Přednáška 1

1.10. 2024

budou domácí úkoly (asi 5 za semestr)

přednáší Martin Čížek, na stránkách má informace

na stránkách je i sylabus, jehož součástí jsou podkladové poznámky k přednáškám

zápočet:

- během roku 5 domácích úloh, za které lze získat max 50 bodů
- na konci semestru písemka max 50 bodů
- alespoň 50 bodů = zápočet
- nad 75 bodů = zkouška bez písemky
- jakési bonusy pro nejlepší

je možné zápočtovou písemku psát doma a přinést, ale v takovém případě se ruší možnosti odpuštění zkouškové písemky

totéž platí při pozdním odevzdání úkolů

QM-I-1 Úvodní poznámky

- <u>diskrétní charakter některých veličin</u>

(redukovaná) Planckova konstanta – zpravidla se používají takové jednotky, v nichž je $\hbar = 1$

$$\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s} = 0{,}66\ \mathrm{eV \cdot fs}$$

akce $S(q,\dot{q},t_1,t_2) = \int_{t_1}^{t_2} L(q,\dot{q},t)\,dt = \underbrace{\int p(x)\,dx}_{= \int \sqrt{E - V(x)}\,2m\,dx} - Et$ ... plocha ve fázovém diagramu

akce se porovnává s Planckovou konstantou

systém začíná být kvantovaný tehdy, když rozdíl ploch ve fázovém diagramu, který jsme schopni v daném experimentu rozlišit, je řádově srovnatelný s Planckovou konstantou

relace neurčitosti... ħ má stejný rozměr jako součin polohy a hybnosti nebo jako moment hybnosti $\frac{\hbar}{2} < \Delta x \Delta p$

- <u>pravděpodobnostní charakter kvantové mechaniky</u>

Stern-Gerlachův experiment $Ag:\ [Kr]\ 4d^{10}\ 5s^1 \Rightarrow 47$ elektronů

atom je neutrální částice s magnetickým momentem

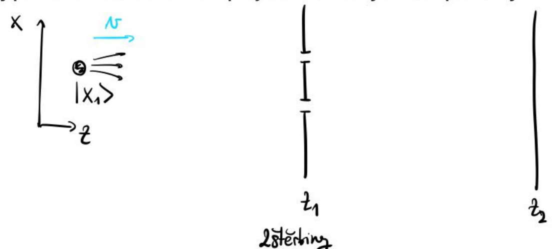
v případě stříbra se dá atom modelovat jednou částicí se spinem 1/2

měření Stern-Gerlacha je složitý proces; my si ale prostě řekneme: *máme částici se spinem 1/2 a měříme projekci momentu hybnosti do osy z*

Stern-Gerlach: atom dopadne vždy buď nahoru nebo dolů (žádné půlatomy)
nelze předpovědět, kam dopadne jeden atom
lze předpovědět celkovou statistiku

⬆️ jeden z prototypů kvantového experimentu

prototyp číslo 2: měření spojité veličiny, zde polohy



rozměr z nám přes v slouží k měření času

částice zaniká, pokud neproletí jednou ze štěrbin – filtrování

chceme měřit souřadnici x

- princip superpozice

1.10.2024

interference

Přednáška 2 – formalismus QM

3.10.2024

lineární vektorový prostor V prvek – vektor (ket vektor) = stav

množina stavů, na které je definováno sčítání, násobení komplexním číslem

$V = \{\varphi\}$ $\varphi_1 + \varphi_2 \in V$ $c\varphi \in V$ $c \in \mathbb{C}$

- vektorový prostor je uzavřen na tyto dvě operace – princip superpozice
- axiomy vektorového prostoru: asociativní vůči +, komutativní vůči +, existuje nulový prvek vůču + (nulový vektor), existuje inverzní prvek (– ϕ); distributivní a asociativní vůči násobení číslem, existuje jednička
- opak: lineární závislost, dimenze prostoru, báze prostoru
- na vektorovém prostoru máme **skalární součin** zobrazení $V \times V \to \mathbb{C}$ tž.

1) $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$

2) $\langle\varphi|c_1\psi_1 + c_2\psi_2\rangle = c_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + c_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$

3) $\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$ & $\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\varphi\rangle = 0$

- pomocí skalárního součinu definujeme délku a kolmost vektorů

$\|\varphi\| = \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}$ $\langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \varphi$ a ψ jsou kolmé

- ortonormální báze $\{\varphi_i\}_{i=1}^d$ tž. $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$

$\forall\psi \in V \;\; \exists c_i$ tž $\psi = \sum_i c_i\varphi_i$ $c_i = \langle\varphi_i|\psi\rangle$

- každý konečnědimenzionání lin. vektorový prostor je izomorfní prostoru $\mathbb{C}^d \longrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_d \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^d$ je izomorfní $|\psi\rangle$

...jedna z možných reprezentací $|\psi\rangle$

duální prostor V^* (prostor bra-vektorů)

= prostor všech lineárních funkcionálů na V $F \in V^*$ ... $F: V \to \mathbb{C}$

linearita $F(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2) = c_1 F(\varphi_1) + c_2 F(\varphi_2)$

Duální prostor je taky lineární vektorový prostor $F_\psi(\varphi) = \langle\psi|\varphi\rangle$

V^* je izomorfní V

$F(\varphi) = \sum c_i \underbrace{F(\varphi_i)}_{f_i^* \text{... nějaké číslo}} = \langle\psi|\varphi\rangle$ kde $\psi = \sum_i f_i\varphi_i$

$\| $

$\sum_i f_i^* \underbrace{\langle\varphi_i|\varphi\rangle}_{c_i} = \sum_i c_i f_i^*$ (a.h.a. funguje to)

$= \underbrace{\begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* & \dots & f_d^* \end{pmatrix}}_{\text{řádkový vektor}} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_d \end{pmatrix}$

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_d \end{pmatrix}$ $\langle\psi| = \begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* & \dots & f_d^* \end{pmatrix}$

hermitovské sdružení

Diracova bra-ketová notace

$|\psi\rangle$ sloupcový vektor, ketvektor

$\langle\psi|\varphi\rangle$ ... skalární součin
bra-ket

$\langle\psi|$ řádkový vektor, bra vektor
funkcionál

3.10.2024

lineární operátory

$\hat{A}: V \to V \qquad \forall \psi \in V \;\; \exists \varphi \in V$ tž. $A\psi = \varphi$ tj definiční obor $\hat{A}$ je celé V $\quad \mathcal{D}(\hat{A}) = V$
ale obor hodnot ně nemusí být celé V $\quad R(\hat{A}) \subset V$

linearita $\quad \hat{A}\left(c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle\right) = c_1 \hat{A}|\psi_1\rangle + c_2 \hat{A}|\psi_2\rangle$

ztotožnění operátorů s maticemi pomocí ON báze prostoru $\{|\varphi_i\rangle\}_{i=1}^{d} \qquad \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$

maticové elementy $\quad a_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{A} | \varphi_j \rangle$

lze pak psát $\quad \hat{A}|\psi\rangle = \hat{A} \sum_i c_i |\varphi_i\rangle = \hat{A} \sum \langle \varphi_i|\psi\rangle |\varphi_i\rangle$

$\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle = \sum d_j |\varphi_j\rangle \qquad d_j = \langle \varphi_j | \varphi \rangle = \langle \varphi_j | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \varphi_j | \hat{A} \sum c_i |\varphi_i\rangle$

$$\boxed{d_j = \sum_i c_i a_{ji}} \longleftarrow = \sum_i c_i \langle \varphi_j | \hat{A} | \varphi_i \rangle$$

rovnost operátorů $\quad \hat{A} = \hat{B} \iff \hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}|\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \in V$

$\exists$ **nulový operátor** $\hat{O} \quad \hat{O}|\varphi\rangle = \theta$ nulový vektor $\qquad \hat{O}$ v libovolné bázi odpovídá nulová matice

jednotkový operátor $\mathbb{1} \qquad \mathbb{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \qquad \mathbb{1}$ v libovolné bázi je jednotková matice

sčítání operátorů $\quad (\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$
asociativita (z asociativity sčítání vektorů)

násobení operátorů – skládání zobrazení $\qquad (\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}\underbrace{(\hat{B}|\psi\rangle)}_{\text{vektor}}$
obecně $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

komutátor operátorů $\quad [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

operátory fyzikálně budou často (ne vždy) odpovídat měřitelným veličinám, ale někdy také transformacím aj.

inverzní operátor $\hat{A}^{-1}$ je tž. $\quad \hat{A}^{-1}\hat{A} = \mathbb{1}$

funkce operátorů

- mocniny $\quad \hat{A}^2 = \hat{A}\hat{A}, \qquad \hat{A}^{n+1} = \hat{A}\hat{A}^n$
- $\hat{A}^{-n}$ je operátor inverzní k $\hat{A}^n$; $\quad \hat{A}^{-n} = (\hat{A}^{-1})^n, \quad$ funguje $\hat{A}^{m+n} = \hat{A}^m \hat{A}^n$
- pomocí mocnin lze definovat všechny funkce s konvergentní Taylorovou řadou (sinus, exp ...)
  jestliže $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(0)\, z^k$ má poloměr konv. ∞
  uděláme
  $$f(\hat{A}) \overset{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(0)\, \hat{A}^k$$
  $\Rightarrow$ platí známé identity jako např. $\quad e^{i\hat{A}} = \cos\hat{A} + i \sin\hat{A}$
  ALE obecně neplatí vše, např. $\quad e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \quad$ (pro to je třeba komutativita ~~sčítání~~ násobení (?))

sdružený operátor $\hat{A}^+$ obecně definován vztahem $\quad \langle \varphi | \hat{A}\psi \rangle = \langle \hat{A}^+ \varphi | \psi \rangle$

$|\psi\rangle \quad () \quad \longrightarrow \quad F_\psi \qquad \langle \psi |$

$\hat{A}|\psi\rangle \quad (\ \ )() \quad \longrightarrow \quad F_{??} \qquad \langle \psi | \hat{A}^+ \quad (\ \ )^+$

vlastnosti hermitovského sdružení – na cviku

$$(c\hat{A})^+ = c^* \hat{A}^+$$
$$(\hat{A} + \hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+$$
$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$$

3.10.2024

vnější součin $|\psi\rangle\langle\varphi|$ $\qquad (\,) \; (\quad) = \left(\text{matice} \right)$

operace, která dvěma vektorům přiřadí operátor $\hat{A}$ takový, že $\hat{A}|v\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|v\rangle = \underbrace{\langle\varphi|v\rangle}_{\text{číslo}} |\psi\rangle$

platí $(|\psi\rangle\langle\varphi|)^+ = |\varphi\rangle\langle\psi|$

jednotkový operátor pomocí vnějšího součinu $\boxed{\mathbb{1} = \sum_{i=1}^{d} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}$

operátor $\hat{A} = \sum_{i,j} a_{ij} \, |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$ $\qquad$ ověření: $\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \hat{A} \sum_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$

$$= \sum\sum |\varphi_i\rangle \underbrace{\langle\varphi_i|\hat{A}|\varphi_j\rangle}_{a_{ij}} \langle\varphi_j| = \sum\sum a_{ij} \, |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

(ortogonální)
projekční operátor splňuje 2 vlastnosti: $\hat{P}^2 = \hat{P}$ idempotence

$\hat{P}^+ = \hat{P}$ ortogonalita

$|b\rangle = \hat{P}|a\rangle \qquad |\tilde{b}\rangle = |a\rangle - |b\rangle = (\mathbb{1} - \hat{P})|a\rangle$

pak platí $\langle\tilde{b}|b\rangle = 0$

protože $\langle\tilde{b}|b\rangle = \langle a|(\mathbb{1} - \hat{P}^+)\hat{P}|a\rangle$

$$= \langle a|\hat{P} - \hat{P}\hat{P}|a\rangle = \langle a|\hat{P} - \hat{P}|a\rangle$$
$$= \langle a|\hat{0}|a\rangle = 0$$

* dvě přednášky chybí *

15. 10. 2024

Přednáška 5

Kompatibilní pozorovatelné df. $[\hat{A},\hat{B}] = 0$

triviální pozorování $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$

Lemma 1 (invariance vlastních podprostorů) Nechť $\hat{A}, \hat{B}$ jsou dvě pozorovatelné veličiny, nechť $\hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$.
Potom $\underbrace{|\psi'\rangle := \hat{A}|\psi\rangle}_{\text{užitečné – generace nových vl. vektorů}}$ je také vlastní vektor $\hat{B}$ a příslušný stejnému vl. číslu.

Důkaz: $\hat{B}|\psi'\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}\, b|\psi\rangle = b\hat{A}|\psi\rangle = b|\psi'\rangle$ $\square$

Lemma 2 (blokově diagonální struktura) Nechť $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, nechť $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ $i = 1,\dots,d$, ($|a_i\rangle$ báze), $a_1 \neq a_2$ (⊛).
Pak $\langle a_1|\hat{B}|a_2\rangle = 0$.
Tzn. v bázi $|a_i\rangle$ je $\hat{B}$ reprezentováno blokově diagonální maticí, pokud se báze dobře uspořádá.

Důkaz: $0 = \langle a_1|[\hat{A},\hat{B}]|a_2\rangle = \langle a_1|\hat{A}\hat{B}|a_2\rangle - \langle a_1|\hat{B}\hat{A}|a_2\rangle = \underbrace{(a_1 - a_2)}_{\neq 0\ (⊛)} \underbrace{\langle a_1|\hat{B}|a_2\rangle}_{=0}$ $\square$

$\hat{A} = \hat{A}^+ \quad \langle a_1|\hat{A}^+ = \langle a_1|a_1 \quad \Rightarrow$

Lemma 3 $[\hat{A},\hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{P}_a, \hat{P}_b] = 0 \quad \forall a,b$ (ve skutečnosti ekvivalence, ale opačná implikace je triviální) z $\hat{A} = \sum_a a\hat{P}_a$

Důkaz: nejdříve $[\hat{A},\hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{P}_a, \hat{B}]$ $\forall$ vlastní čísla a (z tohoto již závěr odvodíme)

$\langle a_1\alpha_1|[P_{a},\hat{B}]|a_2\alpha_2\rangle$ — chceme ukázat, že to je nula; značení: $\hat{A}|a_i\alpha_j\rangle = a_i|a_i\alpha_j\rangle$ α_j rozlišuje vlastní vektory příslušné stejnému vl. číslu a_i

↳ $a_1 \neq a_2$: $\langle a_1\alpha_1|P_a B|a_2\alpha_2\rangle - \langle a_1\alpha_1|BP_a|a_2\alpha_2\rangle = \underbrace{(\delta_{a_2a} - \delta_{a_1a})}_{\neq 0 \text{ pro } a_1\neq a_2} \underbrace{\langle a_1\alpha_1|\hat{B}|a_2\alpha_2\rangle}_{=0 \text{ z lemmatu 2}} = 0$

↳ $a_1 = a_2$: $\delta_{a_1a}\left(\langle a_1\alpha_1|\hat{B}|a_2\alpha_2\rangle - \langle a_1\alpha_1|\hat{B}|a_2\alpha_2\rangle\right) = 0$

$[\hat{A},\hat{B}] = 0 \Rightarrow [\hat{P}_a,\hat{B}] = 0 = [\hat{B},\hat{P}_a] \Rightarrow [\hat{P}_b,\hat{P}_a] = 0 = [P_a, P_b]$ $\square$

Věta: Pokud 2 samosdružené operátory komutují, pak existuje společná ortonormální báze z vlastních vektorů.
(platí též obrácená implikace, ale dokázat ji je triviální)

Důkaz:
$\hat{A} = \sum a\hat{P}_a \qquad [\hat{A},\hat{B}] = 0 \overset{L3}{\Rightarrow} [\hat{P}_a,\hat{P}_b] = 0$ (⊛)
$\hat{B} = \sum b\hat{P}_b$

„fyzici občas dělají takové nepřesnosti, ale tak jste na to zvyklí, fyzici tomu rozumí ... anebo tomu nerozumí, když nejsou dobří fyzici"

df. $\hat{P}_{ab} = \hat{P}_a \cdot \hat{P}_b = \hat{P}_b \cdot \hat{P}_a$

tvrzení: je to projektor
– samosdružený $P_{ab}^+ = P_b^+ P_a^+ = P_b P_a = P_{ba} = P_{ab}$
– $P_{ab}^2 = P_{ab}P_{ab} = P_aP_bP_aP_b = P_aP_aP_bP_b = P_a^2P_b^2 = P_aP_b = P_{ab}$

} důsledky (⊛)

ON báze z vlastních vektorů $\hat{P}_{ab}$: $\hat{P}_{ab}|a,b,k\rangle = |a,b,k\rangle$ (vl. číslo 1) $\quad k = 0,\dots,d$
tvrdíme, že to je společná ON báze $\hat{A}$ a $\hat{B}$
ortonormalita báze? $\langle a,b,k|a',b',k'\rangle = \langle a,b,k|\underline{P_{ab}^+P_{a'b'}}|a',b',k'\rangle = ⊛$

$= P_{ab}P_{a'b'} = P_aP_bP_{a'}P_{b'} = P_aP_{a'}P_bP_{b'} = \delta_{aa'}\delta_{bb'}P_aP_b$

⊛ $\begin{cases} = 0 & a'\neq a \text{ nebo } b\neq b' \\ = \langle a,b,k|a,b,k'\rangle & \end{cases}$ již vlastní vektory vícedimenzionálních vlastních podprostorů – můžeme zde zvolit ON bázi

$\hat{A}|a,b,k\rangle = a|a,b,k\rangle$
$\hat{B}|a,b,k\rangle = b|a,b,k\rangle$

z $\hat{A} = \sum_a a\hat{P}_a$, $\hat{B} = \sum_b b\hat{P}_b$

$\hat{P}_a = \sum_b \hat{P}_{ab} = \sum_b \hat{P}_a\hat{P}_b = \hat{P}_a\sum_b\hat{P}_b = \hat{P}_a \mathbb{1}$
$\hat{P}_b = \sum_a \hat{P}_{ab}$ obdobně

$$\Rightarrow \boxed{\hat{A} = \sum_a \sum_b a \hat{P}_{ab} \qquad \hat{B} = \sum_a \sum_b b \hat{P}_{ab}}$$

15.10.2024

společný spektrální rozklad

„vektorový operátor" $\{\hat{A}, \hat{B}\} |a,b,k\rangle = \{a,b\} |a,b,k\rangle$

např. potom $\hat{\vec{x}} = \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$

společný rozklad jednotky $\mathbb{1} = \sum_a \sum_b \hat{P}_{ab} = \sum_a \sum_b \hat{P}_a \hat{P}_b = \sum \hat{P}_a \sum \hat{P}_b = \mathbb{1}\mathbb{1} = \mathbb{1}$

Funkce dvou operátorů

funkce dvou proměnných: $f(a,b) = f(0,0) + a\partial_a f + b\partial_b f + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{a}\partial_a^2 f + \frac{1}{a}\partial_b^2 f + (\partial_{ab} f + \partial_{ba} f)\, ab\right)$

$f(\hat{A}, \hat{B}) = f_{00} + f_a A + f_b B + \frac{1}{2} A^2 f_{aa} + \frac{1}{2} \hat{B} f_{bb} + \quad AB$ nebo BA??

pro $[A,B] = 0 \quad f(\hat{A}, \hat{B}) = \sum_{a,b} f(a,b)\, \hat{P}_{ab}$

Zobecnění na více operátorů $A, B, C, \dots$ všechny komutují $\Rightarrow \exists$ společná ON báze $|a,b,c,\dots,k\rangle$ tž. $\hat{A}|a,b,c,\dots,k\rangle = a|a,b,c,\dots,k\rangle$ atd.

$$\hat{A} = \sum_a a \hat{P}_{abc} = \sum_a a\, |a,b,c,\dots,k\rangle\langle a,b,c,\dots,k|$$

atd.

obecně: množina komutujících operátorů $\{\hat{A}^1, \hat{A}^2, \dots, \hat{A}^n\}$

tj. $[\hat{A}^i, \hat{A}^j] = 0 \quad \forall$ dvojici i,j

$\Rightarrow \exists$ sada $|a_1, a_2, \dots, a_n, k\rangle$ s příslušnými vlastními čísly

úplný systém komutujících operátorů (ÚSKO)

Df. pokud $|\psi\rangle$ je vlastním vektorem všech $\hat{A}_i$ $\Rightarrow$ je dán jednoznačně až na fázi a normalizaci

(„už nepotřebuju to číslo k – ten dodatečný index ve vlastních vektorech")

$\Rightarrow$ báze se dá napsat jednoznačně jako $|a^1, a^2, a^3, \dots, a^n\rangle$, $\{a_1, \dots, a_n\} \subset M$ nějaká množina povolených kombinací indexů

„i když to vypadá složitě, tak je to vlastně úplně jednoduché"

Věta: Pokud $[\hat{F}, \hat{A}_i] = 0$ pro všechny $\hat{A}_i \in$ ÚSKO, pak $\hat{F} = f(\hat{A}^1, \hat{A}^2, \dots, \hat{A}^n)$.

(už ho lze napsat jako funkci těch ostatních, je „navíc")

Důkaz: $\hat{F}, \hat{A}_i$ komutují $\Rightarrow \exists$ ON společná báze $|f, a^1, a^2, \dots, a^n\rangle$

$\hat{A}_i$ je ÚSKO $\Rightarrow \exists! \ |f, a^1, a^2, \dots, a^n\rangle \ \forall$ sadu vlastních čísel $a^1, a^2, \dots, a^n$

↳ existuje právě jeden, označme ho $|\psi\rangle$

víme, že $|\psi\rangle$ je vl. vektor $\hat{F}$ $\quad \hat{F}|\psi\rangle = f|\psi\rangle$ kde $f = f(a^1, a^2, \dots, a^n)$

$\hat{F} = f(\hat{A}^1, \hat{A}^2, \dots, \hat{A}^n)$

Dávání stavových prostorů dohromady

• **direktní součet** $\mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \oplus \mathcal{H}^2 \qquad \{|\psi^i\rangle\} \in \mathcal{H}^i$

$\mathcal{H} = \{|\psi\rangle\} :=$ prostor všech uspořádaných dvojic $|\psi\rangle = (|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle)$

definujeme v $\mathcal{H}$ $\quad |\psi\rangle + |\psi'\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_1'\rangle, |\psi_2\rangle + |\psi_2'\rangle)$

$\alpha|\psi\rangle = (\alpha|\psi_1\rangle, \alpha|\psi_2\rangle)$

sk. součin $\langle\psi|\psi'\rangle = \underbrace{\langle\psi_1|\psi_1'\rangle}_{v\ \mathcal{H}^1} + \underbrace{\langle\psi_2|\psi_2'\rangle}_{v\ \mathcal{H}^2}$

$\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}^1 + \dim \mathcal{H}^2$

operátory v $\mathcal{H}$ – operátor z $\mathcal{H}^1$ je třeba dodefinovat na zbytku $\mathcal{H}$ 15.10.2024

- direktní součin $\mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^2$

formální definice: nechť v $\mathcal{H}^1$ máme ON bázi $|\varphi_i^1\rangle$, v $\mathcal{H}^2$ $|\varphi_i^2\rangle$

potom $\mathcal{H}$ = lineární obal $\left(|\varphi_{n_1}^1\rangle \otimes |\varphi_{n_2}^2\rangle\right)$ $\forall$ dvojice n_1, n_2

$|\psi\rangle = \sum \psi_{n_1 n_2} |\varphi_{n_1}\rangle \otimes |\varphi_{n_2}\rangle$

součet $|\psi\rangle + |\psi'\rangle = \sum \left(\psi_{n_1 n_2} + \psi'_{n_1 n_2}\right) |\varphi_{n_1}\rangle \otimes |\varphi_{n_2}\rangle$

sk. součin $\langle\psi|\psi'\rangle = \sum \psi^*_{n_1 n_2} \psi'_{n_1 n_2}$

$|\psi^1\rangle \in \mathcal{H}^1$
$|\psi^2\rangle \in \mathcal{H}^2$ $\quad |\psi\rangle = |\psi^1\rangle \otimes |\psi^2\rangle \Rightarrow \quad \psi_{n_1 n_2} = \psi_{n_1}^* \psi_{n_2}$

$|\psi\rangle = |\psi^1\rangle \otimes |\psi^2\rangle$
$|\tilde{\psi}\rangle = |\tilde{\psi}^1\rangle \otimes |\tilde{\psi}^2\rangle$

$$\langle\psi|\tilde{\psi}\rangle = \underbrace{\langle\psi^1|\tilde{\psi}^1\rangle}_{v\,\mathcal{H}^1} \underbrace{\langle\psi^2|\tilde{\psi}^2\rangle}_{v\,\mathcal{H}^2}$$

Přednáška 6

17.10.2024

entanglement – separované vs. entanglované stavy

$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \qquad |\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |\varphi_i^{(1)}\rangle |\varphi_j^{(2)}\rangle$

pokud $\exists\, |\psi^{(1)}\rangle \in \mathcal{H}^{(1)}$ a $|\psi^{(2)}\rangle \in \mathcal{H}^{(2)}$ tak, že $|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle \otimes |\psi^{(2)}\rangle$, pak $|\psi\rangle$ nazveme separovaným/faktorizovaným stavem

pro separovaný $|\psi\rangle$ musí jít psát $\psi_{ij} = \psi_i^{(1)} \psi_j^{(2)}$ (tenzorový součin dvou vektorů)

tj. matice ψ_{ij} musí mít hodnost 1

když |ψ› není separovatelný, nazveme ho entanglovaným (zašmodrchaným, uwu)

OPERÁTORY rozšíření na $\mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^2$

měřitelné veličiny $\quad \hat{A}$ v prostoru $\mathcal{H}^{(1)}$ – rozšíření na $\mathcal{H} \Rightarrow \hat{A}_{\mathcal{H}^1} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{H}^2}$

podobně rozšíření B z prostoru $\mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathbb{1}_{\mathcal{H}^1} \otimes B_{\mathcal{H}^2}$

obecně: $\hat{A} \otimes \hat{B}$ operátor je definován svým působením na vektory

$|\psi\rangle = |\psi^1\rangle \otimes |\psi^2\rangle$ separovatelný

$\hat{A} \otimes \hat{B}\, |\psi\rangle = \hat{A}|\psi^1\rangle \otimes \hat{B}|\psi^2\rangle$

zašmodrchané vektory umíme napsat jako lineární kombinaci separovatelných

– pro $\otimes$ na operátory dodefinujeme linearitu a jsme hotovi

př. • matematické $\quad \mathcal{H} = \mathbb{C}^1 \ (|e_1\rangle) \quad \mathcal{H}' = \mathbb{C}^2 \ (|e_1'\rangle, |e_2'\rangle) \quad \mathcal{H}'' = \mathbb{C}^3$ — dimenze

př. $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}' = \mathbb{C}^3 \qquad d = d_1 + d_2$

$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}' = \langle |e_1\rangle \otimes |e_1'\rangle, |e_1\rangle \otimes |e_2'\rangle \rangle \equiv \mathbb{C}^2 \qquad d = d_1 d_2$

$\mathcal{H}' \oplus \mathcal{H}'' = \mathbb{C}^5$

$\mathcal{H}' \otimes \mathcal{H}'' \equiv \mathbb{C}^6$ (6 bázových vektorů)

$$|\psi'\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \end{pmatrix} \in \mathcal{H}' \qquad |\psi''\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1'' \\ \psi_2'' \\ \psi_3'' \end{pmatrix} \in \mathcal{H}''$$

$$|\psi'\rangle \oplus |\psi''\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \\ \psi_1'' \\ \psi_2'' \\ \psi_3'' \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^5$$

$|\Psi\rangle = |\psi'\rangle \otimes |\psi''\rangle$ = sloupeček ? přesná číselná podoba nejednoznačná, dáno uspořádáním báze 17. 10. 2024

řekněme, že to chceme třeba takto

$$\begin{matrix} |e_1'\rangle|e_1''\rangle \\ |e_1'\rangle|e_2''\rangle \\ |e_1'\rangle|e_3''\rangle \\ |e_2'\rangle|e_1''\rangle \\ |e_2'\rangle|e_2''\rangle \\ |e_2'\rangle|e_3''\rangle \end{matrix} \Rightarrow |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1'\psi_1'' \\ \psi_1'\psi_2'' \\ \psi_1'\psi_3'' \\ \psi_2'\psi_1'' \\ \psi_2'\psi_2'' \\ \psi_2'\psi_3'' \end{pmatrix}$$

obecněji $\mathbb{C}^n \oplus \mathbb{C}^m = \mathbb{C}^{n+m}$

$\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m = \mathbb{C}^{mn}$

- fyzikální příklady
  - kvantové tečky ① ② ③
    $\mathcal{H}^1 = \mathcal{L}\{|1\rangle, |2\rangle\}$
    $\mathcal{H}^2 = \mathcal{L}\{|3\rangle\}$ $\Rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \oplus \mathcal{H}^2$
  - dvě částice, např. dva stejné elektrony
    $\mathcal{H}^1 = \mathcal{L}\{|d\rangle, d=1,\dots,n\}$ (n-tečka)
    $\mathcal{H}^2 = \mathcal{L}\{|d\rangle, d=1,\dots,n\}$ (přidáme do ní druhou částici)
    $\Rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^2$
    tzn. $\mathcal{H} = \mathcal{L}\{|d\rangle|d'\rangle, d,d'=1,\dots,n\}$
  - částice se spinem v tečkách
    $\mathcal{H}^1 = \mathcal{L}\{|d\rangle, d=1,\dots,n\}$
    $\mathcal{H}^2 = \mathbb{C}^2 = \mathcal{L}\{\underset{\frac{\hbar}{2}}{|+\rangle}, \underset{-\frac{\hbar}{2}}{|-\rangle}\}$

$\mathcal{H} = \mathcal{H}^1 \otimes \mathcal{H}^2 = \mathcal{L}\{|ds\rangle = |d\rangle \otimes |s\rangle\}$

operátor polohy $\hat{x}|d\rangle = d|d\rangle$ tzn. $\hat{x} = \sum d\,|d\rangle\langle d|$

operátor spinu $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right)$

tyto operátory na $\mathcal{H}$: $\hat{x} \otimes \mathbb{1}$ & $\mathbb{1} \otimes \hat{S}_x$

Dodatek: **NORMÁLNÍ OPERÁTORY** - def.: $\boxed{[N, N^+] = 0}$ tzn. $NN^+ = N^+N$

pro libovolný operátor můžeme psát
$$\hat{N} = \underbrace{\frac{\hat{N} + \hat{N}^+}{2}}_{=:\hat{R}} + \underbrace{\frac{\hat{N} - \hat{N}^+}{2i}}_{=:\hat{I}} i \Rightarrow \hat{N} = \hat{R} + i\hat{I}$$

normální operátory mají tu výhodu, že $\hat{R}$ & $\hat{I}$ jsou samosdružené, tj. odpovídají měřitelným veličinám
a navíc $\hat{R}$ a $\hat{I}$ pro normální operátor komutují
normální operátory se dají diagonalizovat pomocí ON báze vlastních vektorů, protože

speciálním případem normálního operátoru je **unitární operátor** $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^+ \Rightarrow \boxed{[\hat{U}, \hat{U}^+] = 0}$

ČASOVÝ VÝVOJ - poznámky

Schrödingerova rovnice $\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle}$

formální řešení - je to ODR, resp. soustava ODR $\Rightarrow \boxed{|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t}}$

$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle$

platí $\frac{d}{dt} e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t} = \frac{\hat{H}}{i\hbar} e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t}$

dosadíme-li do rovnice $LS = \cancel{i\hbar}\frac{\hat{H}}{\cancel{i\hbar}} e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t}|\psi_0\rangle = \hat{H} e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t}|\psi_0\rangle$

$PS = \hat{H} e^{\frac{\hat{H}}{i\hbar}t}|\psi_0\rangle$ $LS = PS$

17. 10. 2024

píše se též $|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}}_{\text{EVOLUČNÍ OPERÁTOR}} |\psi_0\rangle = \underbrace{\hat{U}(t)}|\psi_0\rangle$

celé to ale funguje jen pro $\hat{H}$ nezávislý na čase!

STACIONÁRNÍ STAVY = vlastní stavy hamiltoniánu $\hat{H}|\psi_{i,j}\rangle = E_i|\psi_{ij}\rangle$

časový vývoj jednoduchý: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle$

$$\Rightarrow |\psi_{n,k}(t)\rangle = \underbrace{e^{\frac{E_n}{i\hbar}t}}_{\text{číslo}} |\psi_{n,k}(0)\rangle$$

stav se nemění v čase, $\overset{\text{žádné}}{}$ měření nezávisí na čase

vektoru se mění fáze, ale to neovlivní měřitelné hodnoty

obecný stav: jak nalézt časový vývoj?
- evoluční operátor $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi_0\rangle$
- rozvinutí do vlastních stavů $\hat{H}$ $|\psi_0\rangle = \sum_{n,k} c_{n,k}|\psi_{n,k}\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,k} c_{n,k}\, e^{\frac{E_n}{i\hbar}t}|\psi_{n,k}\rangle$$

INTEGRÁLY POHYBU (zachovávající se veličiny)

↳ df. $\hat{A}$ je IP, pokud $[\hat{A},\hat{H}] = 0$ (rozhodně pro časově nezávislý $\hat{H}$)

tvrzení: v libovolném stavu $|\psi\rangle$ měření $\hat{A}$ nezávisí na čase

přesněji $\langle\hat{A}\rangle$ nezávisí na čase $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle\psi_0|\hat{U}^+(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\psi_0\rangle = \underline{\langle\psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle}$

ovšem $\hat{A}$ komutuje s $\hat{H}$, tedy i s $\hat{U}(t)$, a zároveň $\hat{U}^+\hat{U} = \mathbb{1}$

nezávislé na čase

ještě přesněji: pravděpodobnost naměření hodnoty a je $p_a = \langle\psi|\hat{P}_a|\psi\rangle$

ovšem a je vl. číslo $\hat{A}$

měli jsme lemma říkající $[\hat{A},\hat{H}] \Rightarrow [\hat{P}_a,\hat{H}]$

$$\Rightarrow p_a = \langle\psi(t)|\hat{P}_a|\psi(t)\rangle = \underline{\langle\psi_0|\hat{P}_a|\psi_0\rangle}$$

pozn. nechť $[\hat{A},\hat{H}] = 0 \Rightarrow [\hat{A}, f(\hat{H})] = 0$

dk.: Taylor

$$\hat{H} = \sum_n E_n\hat{P}_n \qquad f(\hat{H}) = \sum_n f(E_n)\hat{P}_n$$

$$[\hat{A}, f(\hat{H})] = [\hat{A}, \sum f(E_n)\hat{P}_n] = \sum f(E_n)\underbrace{[\hat{A},\hat{P}_n]}_{\substack{=0 \\ (\text{lemma } 3)}} = 0$$

pozn. 2 $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} \neq e^{\hat{A}+\hat{B}}$ obecně neplatí

ale pokud $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, pak $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}$ ano

$$\hat{A} = \sum a\hat{P}_{ab} \qquad e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = \left(\sum e^a e^b \hat{P}_{ab}\right) = \sum e^{a+b}\hat{P}_{ab} = e^{\hat{A}+\hat{B}}$$

$$\hat{B} = \sum b\hat{P}_{ab}$$

22.10.2024

Přednáška 7

Formalismus kvantové teorie II – spojité spektrum

přechod $\sum \to \int$

$$\mathbb{1} = \int dx \; |x\rangle\langle x|$$

$$\mathbb{1}|\psi\rangle = \int dx \; |x\rangle\underbrace{\langle x|\psi\rangle}$$

„koeficienty" vektoru v bázi $|x\rangle$ – $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci

skalární součin $\quad \langle\phi|\psi\rangle = \int_{\sigma(x)} dx \; \phi^*(x)\,\psi(x)$

normování $\quad \langle\psi|\psi\rangle = \int dx \, |\psi(x)|^2$ – tento integrál musí v první řadě existovat $\Rightarrow$ omezení na vlnové funkce $\psi(x) \in L^2(\sigma(x))$

(Př) NEKONEČNÝ ŘETÍZEK kvantových teček

$-3 \quad -2 \quad -1 \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad \dots$

$\dots, |-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$

stavový prostor je $\mathcal{L}\{|n\rangle, n \in \mathbb{Z}\} = $ „$\mathbb{C}^\infty$"

$|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \psi_n |n\rangle$ ... izomorfní prostoru posloupností $\{\psi_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$

$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \phi_n^* \psi_n$

$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |\psi_n|^2$ ... to ale potřebujeme konečné, takže omezení na $\underbrace{\left\{ \{\psi_n\}_{n\in\mathbb{Z}},\ \sum_{n\in\mathbb{Z}} |\psi_n|^2 < +\infty \right\}}_{\text{toto je náš stavový prostor}}$

stavový prostor $\mathcal{H}$

lineární vektorový prostor se skalárním součinem H nazveme Hilbertův prostor, pokud každá cauchyovská posloupnost má v H limitu

$|\varphi_n\rangle$ cauchyovská: $\quad \forall \varepsilon > 0 \quad \exists k$ t. ž. $\quad \forall m,n > k \quad \|\varphi_n - \varphi_m\| < \varepsilon$

norma – indukovaná skalárním součinem $\quad \|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$

limita $|\psi_n\rangle \to |\psi\rangle \iff \|\psi_n - \psi\| \to 0$

$\mathcal{H}$ je separabilní ... $\exists$ spočetná báze $\{|\varphi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ a $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ platí $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle$

($\Rightarrow$ stavový prostor je vždy izomorfní L^2)

př. $L^2([a,b])$ je separabilní – Fourierovy řady

duální prostor $\mathcal{H}^*$

– spojité lineární funkcionály $\quad F: \mathcal{H} \to \mathbb{C}$

jasné

v konečně dimenzionálních prostorech jsou všechny lineární funkcionály spojité

v nekonečně dimenzích $\quad A_1x_1 + A_2x_2 + A_3x_3 + \dots \quad$ PROBLÉM: může se stát $A_n \to \infty$ ... to by se rozbilo

ale spojitý $\iff$ omezený $\quad$ spojité zobrazení: $|\psi_n\rangle \to |\psi\rangle \Rightarrow F[|\psi_n\rangle] \to F[|\psi\rangle]$

omezenost $\exists C$ konst.: $F[|\psi\rangle] < C$

22.10.2024

Rieszova věta o reprezentaci

Pro každý spojitý lineární funkcionál existuje $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ takové, že $F[|\psi\rangle] = \langle \varphi | \psi \rangle$.

$\Rightarrow$ $\mathcal{H}^*$ je izomorfní $\mathcal{H}$

δ funkce ... distribuce $\qquad \bar{\mathcal{H}} \supset \mathcal{H}^* = \mathcal{H} \supset \underline{\mathcal{H}}$ $\rightarrow$ prostor testovacích funkcí

$\downarrow$

lineární funkcionály na $\underline{\mathcal{H}}$

prostor distribucí

$\bar{\mathcal{H}} + \mathcal{H} + \underline{\mathcal{H}}$ Gelfandův triplet - tři prostory

$$\hat{x} = \int x \; |x\rangle\langle x|$$

$$\psi_{x_0}(x) = \langle x | x_0 \rangle \overset{?}{=} c\, \delta(x - x_0)$$

$$\mathbb{1} = \int |x_0\rangle\langle x_0| \, dx_0$$

$$\delta(x - x') = \langle x | \mathbb{1} | x' \rangle = \int dx_0 \underbrace{\langle x | x_0 \rangle}_{\psi^*_{x_0}(x)} \underbrace{\langle x_0 | x' \rangle}_{\psi_{x_0}(x')} = \int dx_0 \; \delta(x - x_0)\, \delta(x' - x_0) = \delta(x' - x)$$

tohle bychom chtěli

zápis v bázi $\quad |\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \int dx \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{\psi(x)} |x\rangle \qquad$ přiřazení vlnové funkce $\psi(x)$ k abstraktnímu vektoru $|\psi\rangle$

$$|\varphi\rangle = \hat{x}|\psi\rangle = \int x \, |x\rangle \underbrace{\langle x | \psi \rangle}_{\psi(x)} dx = \int dx \underbrace{\boxed{x\psi(x)}}_{\varphi(x)} |x\rangle$$

$|\varphi\rangle \rightarrow \varphi(x)$

$|\psi\rangle \rightarrow \psi(x)$

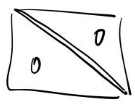
$$\boxed{\varphi(x) = x\psi(x)}$$

matice $\hat{x}$? $\qquad \langle x' | \hat{x} | x \rangle \longrightarrow$ funkce dvou proměnných $\quad m(x, x')$

$$\langle x' | \int x_0 |x_0\rangle\langle x_0| \, dx_0 \, | x \rangle = \int x_0 \; \langle x' | x_0 \rangle \langle x_0 | x \rangle \, dx_0 = \int x_0 \; \delta(x' - x_0) \; \delta(x_0, x) \, dx_0$$

$$= x' \, \delta(x' - x) = x \, \delta(x' - x)$$

„diagonální matice"



$$\hat{x}\,\psi(x) = \int m(x, x')\, \psi(x') \, dx' = \int x \, \delta(x' - x)\, \psi(x') \, dx' = x\, \psi(x)$$

OPERÁTORY

$\hat{A} : \mathcal{D}(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{R}(\hat{A}), \quad \mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}, \; \mathcal{R}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$

definiční obor $\quad$ obor hodnot

někdy $\mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{R}(\hat{A}) = \mathcal{H}$ (např. $\hat{A} = c\mathbb{1}$), ale ne vždy!

př. $\quad \psi(x) = \frac{1}{x} \qquad x\psi(x)$ není L^2, je to konstanta

dodatek: $\mathcal{D}(\hat{A})$ hustá v $\mathcal{H}$

Přednáška 8

24.10.2024

Omezený operátor – lineární operátor je omezený <=> je spojitý.

- omezený operátor definovaný jako: $\exists C$ konst. t.ž. $\dfrac{\| \hat{A}|\psi\rangle \|}{\| |\psi\rangle \|} < C \quad \forall |\psi\rangle$

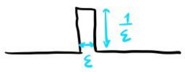
- spojitý operátor: $\forall$ posloupnost $|\psi_n\rangle \to |\psi\rangle$ platí $\hat{A}|\psi_n\rangle \to \hat{A}|\psi\rangle$

každý omezený operátor $\hat{A}$ lze dodefinovat na $\overline{\mathcal{D}(\hat{A})} = \mathcal{H}$

bohužel ne všechny operátory jsou omezené

např.: $\hat{x}$ na $L^2(\mathbb{R})$ $\qquad \hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x)$

není omezený – protipříklad: $\|\varphi_n(x)\| = 1 \Rightarrow \|\hat{x}\,\psi_n(x)\| \to \infty$

např.  $\qquad x\varphi_n(x) \sim n\,\varphi_n(x)$

př. Fourierova transformace je omezený operátor

$$\hat{F}\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\,\psi(k)\,dk \qquad \mathcal{D}(\hat{F}) = L^1 \quad \& \quad L^1 \text{ je hustý v } L^2$$

sdružený operátor $\qquad$ def. $\boxed{\langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle = \langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle}$ $\quad \hat{A}^+$ sdružený k $\hat{A}$

$\forall\varphi \in \mathcal{D}(\hat{A}) \neq \mathcal{D}(\hat{A}^+)$ nemají nutně stejný definiční obor

$\hat{A}^+|\psi\rangle = |f\rangle$

$F_f|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\varphi\rangle^* = \langle\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\hat{A}^+\psi\rangle$

↳ pokud F_f je spojitý lineární funkcionál

Pro fyzikální veličiny uvažujeme samosdružené operátory, tj. $\quad \hat{A} = \hat{A}^+$ vč. $\mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^+)$

subtilní rozdíl mezi samosdruženým a symetrickým operátorem

↳ $\langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad \forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$

Spektrum lineárního operátoru

$\hat{A}|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$ $\qquad$ v konečné dimenzích pro matice: $\Leftrightarrow \det(\hat{A} - \lambda\mathbb{1}) = 0$

v nekonečnědimenzionálních prostorech definujeme spektrum lineárního operátoru

$\lambda \in \mathbb{C}$ nazveme bodem spektra $\lambda \in \sigma(\hat{A})$, pokud zobrazení $\hat{A} - \lambda\mathbb{1}$ není prosté a na $\mathcal{H}$.

tj. se může stát
- není prosté $\Rightarrow \exists |\psi\rangle \neq 0$ t.ž. $(\hat{A} - \lambda\mathbb{1})|\psi\rangle = 0$ tj. $|\psi\rangle \in \operatorname{Ker}(\hat{A} - \lambda\mathbb{1})$

  pak značíme $\lambda \in \sigma_p(\hat{A})$ BODOVÉ (POINT) SPEKTRUM

- $\hat{A} - \lambda\mathbb{1}$ je prosté, ale obor hodnot je různý od $\mathcal{H}$ (není na)
  - $\mathcal{R}(\hat{A} - \lambda\mathbb{1})$ je hustý v $\mathcal{H}$, tj $\overline{\mathcal{R}} = \mathcal{H}$

    $\lambda \in \sigma_c(\hat{A})$ SPOJITÉ SPEKTRUM

    $\| \hat{A}|\varphi_n\rangle - \lambda|\varphi_n\rangle \| \to 0$

    $|\varphi_n\rangle$ limita v $\mathcal{H}$ neexistuje, v $\overline{\mathcal{H}}$ ano
  - $\overline{\mathcal{R}} \neq \mathcal{H}$ $\quad \lambda \in \sigma_r(\hat{A})$ reziduální spektrum – v kvantovce se nám nestane

Boris zdraví náhodného čtenáře.

$\boxed{\text{v kvantové mechanice } \sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A})}$

Normální operátor je t.ž. $[\hat{A}, \hat{A}^+] = 0$

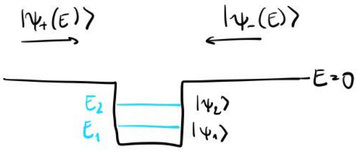
Značení 24. 10. 2024

$a \in \sigma_c(\hat{A})$ dodatečný index — diskrétní: $\hat{A}|a,k\rangle = a|a,k\rangle \qquad \hat{P}_a = \sum_k |a,k\rangle\langle a,k|$

— spojitý: $\hat{A}|a,\alpha\rangle = a|a,\alpha\rangle \qquad \hat{P}_a = \int d\alpha\, |a,\alpha\rangle\langle\alpha,a|$

$$\boxed{\mathbb{1} = \sum_{a\in\sigma_p(\hat{A})} \hat{P}_a + \int_{a\in\sigma_c(\hat{A})} \hat{P}_a\, da}$$

Př. konečná jáma



$$\mathbb{1} = \underbrace{|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|}_{\text{diskrétní část spektra}} + \int_0^\infty \hat{P}_E\, dE$$

spojitá část

$$\hat{P}_E = |\psi_+(E)\rangle\langle\psi_+(E)| + |\psi_-(E)\rangle\langle\psi_-(E)|$$

spektrum samosdruženého operátoru $\quad \sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{R}$

- reálná vlastní čísla a ortogonální vl. vektory $\quad \langle a|a'\rangle = 0 \quad \forall a \neq a' \quad$ a lze z nich vybrat ON bázi

$a, a' \in \sigma_p(\hat{A}) \qquad \langle a|a'\rangle = \delta_{aa'}$ ortogonalita & normalizace

$a, a' \in \sigma_c(\hat{A}) \qquad \langle a|a'\rangle = \delta(a-a')$ normalizace k delta funkci – pro $a=a'$ nedá jedničku, nemá to lodový smysl

pozn. bez distribucí – pracuje se s něčím, čemu se říká projektorová míra

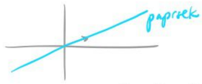
$$\hat{E}(\lambda) = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{a<\lambda} \hat{P}_a\, da \left(= \sum\!\!\!\!\!\!\int_{-\infty}^{\lambda} da \sum_k |a,k\rangle\langle a,k| \right)$$

$$\lim_{\lambda\to-\infty} E(\lambda) = 0 \qquad \lim_{\lambda\to\infty} E(\lambda) \to \mathbb{1}$$

$$\lambda \leq \lambda' \qquad E(\lambda)\,E(\lambda') = E(\lambda)$$

pak definice spektrálního rozkladu pomocí $E(\lambda)$

Doplňující poznámky k formalismu QT



- stav systému je dán paprskem v Hilbertově prostoru $\quad c|\psi\rangle \in \mathcal{H}$
- každé měřitelné nebo pozorovatelné veličině odpovídá samosdružený lineární operátor v H a jeho spektrum udává možné výsledky měření (samosdruženost zaručuje, že výsledky měření budou reálné)
- výsledky měření předpovídáme pomocí spektrálního rozkladu $\quad \hat{A} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{a\in\sigma(\hat{A})} a\, \hat{P}_a$

u spojitých veličin se ptáme na pravděpodobnost, že naměříme hodnotu v nějaké množině (typicky intervalu) – tj. využíváme hustotu pravděpodobnosti (pravděpodobnost změření jedné konkrétní hodnoty je nulová, protože je to jeden bod)

pravděpodobnost nalezení $a\in\Omega \qquad p_{a\in\Omega}(\psi) = \langle\psi| \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Omega da\, \hat{P}_a |\psi\rangle$, pokud $\|\psi\| = 1$ (jinak třeba přenormovat)

$$= \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Omega da\, \underbrace{\langle\psi|\hat{P}_a|\psi\rangle}_{p(a)} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_\Omega da\, p(a)$$

$p(a)$ … hustota pravděpodobnosti

stav po měření $\quad$ ano, $a\in\Omega \qquad |\psi^T\rangle = \underbrace{\sum\!\!\!\!\!\!\int_\Omega da\, \hat{P}_a}_{\hat{P}_{a\in\Omega}} |\psi\rangle$

$\hat{P}_{a\in\Omega}$ – projektor na Ω

ne, $a\notin\Omega \quad \mathbb{1} - \hat{P}_{a\in\Omega} \qquad |\psi^F\rangle = (\mathbb{1} - \hat{P}_{a\in\Omega})|\psi\rangle = |\psi\rangle - |\psi^T\rangle$

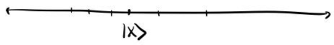
toto nejsou normované stavy – ve skutečnosti $\quad \|\psi^P\|^2 = p_{a\in\Omega}$

Přednáška 9

29. 10. 2024

Částice v 1D

- jeden stupeň volnosti
- přirozený Hilbertův prostor:



$$|\psi\rangle = \int \psi(x)\,|x\rangle\,dx \qquad \|\psi\|^2 = \int |\psi(x)|^2\,dx \overset{\text{potřebujeme}}{<} +\infty$$

$\Rightarrow \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ↳ případně na nějaké podmnožině $\mathbb{R}$ dává-li to zrovna smysl

sk. součin $\langle\phi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \phi^*(x)\,\psi(x)\,dx$

operátory

- operátor polohy $\boxed{\hat{x} = \int x\,|x\rangle\langle x|\,dx}$ v souřadnicové reprezentaci $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$

- operátor hybnosti – k tomu, jak vypadá, se dá dospět různými způsoby historicky z de Broglieho hypotézy a pozorování interference

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx} \text{ příp. } -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\,\partial_x}$$

symetrie operátoru:

$$\langle\varphi|\hat{p}|\psi\rangle = \int \varphi^*(x)\left(-i\hbar\right)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\,dx \underset{pp}{=} -\int\left((i\hbar)^*\frac{\partial}{\partial x}\varphi^*(x)\right)\psi(x)\,dx + \underbrace{\left[\ \sim\ \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0,\text{ protože jsme na } L^2(\mathbb{R})}$$

$$= \left(\int\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)\right)\psi^*(x)\,dx\right)^* = \langle\psi|\hat{p}|\varphi\rangle^*$$

při omezení intervalu nemusí být $\hat{p}$ samosdružený

- operátor hamiltoniánu

postulujeme $\boxed{\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}}$ dle klasické analogie (kinetická energie)

někdy přípnak nuly – hamiltonián volné částice

případně se dá odvodit ze symetrií (Ballentine – učebnice, nebo příští semestr)

v případě interakce $\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})}$ V... potenciál, tvar převzatý z klasické mechaniky

Souřadnicová reprezentace z báze $\{|x\rangle, x\in\mathbb{R}\}$

zároveň se dá chápat jako báze sestavená z vlastních vektorů ÚSKO

v tomto případě ÚSKO jediný operátor $\{\hat{x}\}$

$\hat{x}|x_0\rangle = x|x_0\rangle$

$\phi_{x_0}|x\rangle = \langle x_0|x\rangle = \delta(x-x_0)$

$P_{x_0} = |x_0\rangle\langle x_0|$ projektor na $|x_0\rangle$

systém ve stavu $|\psi\rangle$ ... pravděpodobnost, že naleznu $x_0\in\Omega$

$$p_\psi(x_0\in\Omega) = \int_{x_0\in\Omega}\langle\psi|P_{x_0}|\psi\rangle\,dx_0 = \int_{x_0\in\Omega}\langle\psi|x_0\rangle\langle x_0|\psi\rangle\,dx_0 = \int_\Omega|\psi(x_0)|^2\,dx_0$$

$$= \langle\psi|P_\Omega|\psi\rangle \quad \text{kde } P_\Omega = \int_{x_0\in\Omega}|x_0\rangle\langle x_0|\,dx_0$$

hybnost v souřadnicové reprezentaci

$$\hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle$$
$$\Downarrow$$
$$-i\hbar\frac{d}{dx}\varphi(x) = p_0\,\varphi(x)$$

řešení této dif. rovnice je exponenciála $\Rightarrow$ $\varphi(x) = \bigcirc\, e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$

normovací konstanta?

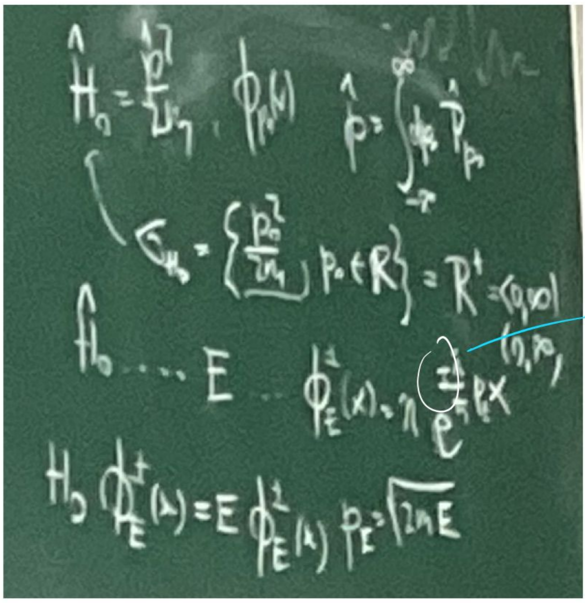
chtěli bychom $\langle p_0|p_0'\rangle = \delta(p-p_0')$

$$\boxed{\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}} \quad \Longleftarrow$$

$$= \langle p_0|\mathbb{1}|p_0'\rangle = \int_{\mathbb{R}}\langle p_0|x\rangle\langle x|p_0'\rangle\,dx = \int e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x}\,e^{\frac{i}{\hbar}p_0' x}\,dx$$

$$= \int e^{-\frac{i}{\hbar}(p_0'-p_0)x}\,dx = 2\pi\hbar\,\delta(p_0'-p_0)$$

29.10. 2024



hamiltonián

$\pm$ ... jedné energii náleží 2 vlastní vlnové funkce

$\hat{H}$ není ÚSKO

Hybnostní reprezentace

ÚSKO je $\{\hat{p}\}$ ... $|p\rangle$, $p \in \mathbb{R}$

$$|\psi\rangle \qquad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

$$\langle p \underbrace{|}_{\mathbb{1}} \psi\rangle = \int_{x\in\mathbb{R}} \underbrace{\langle p|x\rangle}_{\varphi_p^*(x)} \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} dx = \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \psi(x)$$

přechod mezi hybnostní a souřadnicovou reprezentací
matematicky (zpětná) Fourierova transformace

hybnost v hybnostní reprezentaci $\quad \hat{p}\,\psi(p) = p\,\psi(p)$

$\hat{H}_0$ v p-reprezentaci $\quad \hat{H}_0 = f(\hat{p}) \qquad \hat{H}_0\psi(p) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(p) = \frac{p^2}{2m}\psi(p) \qquad$ ($\hat{H}_0$ je pouze funkce $\hat{p}$)

operátor polohy v p-reprezentaci – $\hat{x}$ a $\hat{p}$ nekomutují

$$\hat{x}\,\psi(p) = i\hbar \frac{d}{dp}\psi(p)$$

dá se odvodit z $*$ – chceme shodit dolů x, tak derivujeme exp podle p a doplníme vhodnou konst.

Př. aplikace p-reprezentace – částice v konstantním silovém poli F

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x}$$

stacionární Sch. rovnice $\quad \hat{H}\psi = E\psi \qquad$ pak časový vývoj $\psi\, e^{\frac{Et}{i\hbar}}$

– souř. reprezentace $\quad \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) - Fx\,\psi(x) = E\,\psi(x) \qquad$ diferenciální rovnice 2. řádu

– hybnostní reprezentace $\quad \frac{p^2}{2m}\psi(p) - F\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi(p) = E\psi(p) \qquad$ diferenciální rovnice 1. řádu ... to je lepší než

$$\left(\ln\psi(p)\right)' = \frac{\psi'(p)}{\psi(p)} = \left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\frac{1}{i\hbar F}$$

$$\ln\psi(p) = \frac{p^3}{6mi\hbar F} - \frac{Ep}{i\hbar F} + C$$

$$\psi(p) = A\,\exp\left(-\frac{ip^3}{6m\hbar F} + \frac{iEp}{\hbar F}\right)$$

$A = e^C$

$\psi(x)$ dostaneme Fourierovou transformací tohoto

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \; \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left(px + \frac{pE}{F} - \frac{p^3}{6mF} \right) \right) = \mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}} \left(x + \frac{E}{F} \right) \right)$$

29. 10. 2024

Airyho funkce
$$\mathrm{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt \right) dt$$

ad stupně volnosti: v souřadnicové reprezentaci máme rovnici 2. řádu, zatímco v hybnostní pouze 1. řádu a nalezli jsme jedno řešení s jednou volnou konstantou

ta Fourierova transformace už rovnou předpokládá, že naše řešení nejde do nekonečna, to je podmínka, kterou bychom museli v souřadnicové reprezentaci přidat manuálně

Energetická reprezentace – ÚSKO obsahující hamiltonián volné částice (problém: H není sám o sobě ÚSKO, musíme k němu něco přidat)

zvolíme ÚSKO $\{\hat{H}_0, \hat{n}\}$

vl. stavy $\hat{H}_0$ jsou vlastní stavy $\hat{p}$ $\qquad \hat{H}_0 \varphi_p(x) = \frac{p^2}{2m} \varphi_p(x)$

$$p_E = \sqrt{2mE}$$

$$\varphi_{E,n} = N \, e^{\frac{i}{\hbar} p_E n x}$$

$n = \pm 1$ ... vlastní čísla operátoru $\hat{n} = \frac{\hat{p}}{|\hat{p}|}$

nějaká normovací konst.

používá se v teorii rozptylu

pak se často N volí tak, aby byla normalizace na energii
$$\int \varphi_{E,n}^*(x) \, \varphi_{E',n'}(x) \, dx = \delta_{nn'} \, \delta(E - E')$$

Přednáška 10 (31. 10.) – chyběla jsem

5. 11. – děkanský sportovní den

Přednáška 11 (7. 11.) – zápisky chybí v důsledku mozkomorové aktivity předešlé termodynamiky; dělal se konec harmonického oscilátoru, Hermitovy polynomy, něco s wronskiánem, "zoologie" diskrétnosti/spojitosti spektra pro různé limitní hodnoty potenciálu

12. 11. 2024

Přednáška 12 (myslím, že nastal bordel v počítání)

oscilační věta

- vázané stavy můžeme očíslovat od nuly $E_0, E_1, \dots, E_N$, $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$
- index energie odpovídá počtu kořenů vlnové funkce $\psi_\nu(x)$ má ν kořenů $x_i^{(\nu)}$
- kořen předchozí funkce leží uprostřed mezi kořeny o jedno vyšší vlnové funkce
  $x_i^{(\nu)}$ oddělují $x_i^{(\nu+1)}$

<u>Symetrie</u>

parita

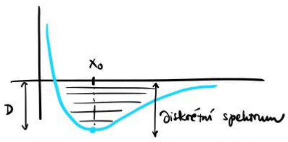
- pro sudý potenciál lze volit vlnové funkce jako vlastní funkce operátoru parity (sudé a liché funkce)

"časová inverze"

- reálný potenciál V*(x) = V(x)
- potom pokud je vlnová funkce ψ(x) stacionární stav s energií E => ψ*(x) je taky stacionární stav s tou samou energií
- dá se přejít k $\psi + \psi^* \sim \mathrm{Re}\,\psi$ $\quad \frac{\psi - \psi^*}{i} \sim \mathrm{Im}\,\psi$ ... reálné funkce

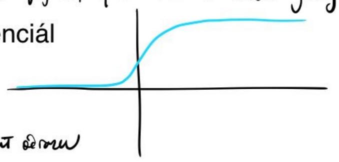
<u>Analyticky řešitelné modely</u>

- V = konst.
- $V = k\hat{x}$ –> Airyho funkce $Ai(cx)$ (neporolené, exponenciálně rostoucí $Bi(cx)$)
  pro po částech lineární potenciál je v každém úseku řešení lineární kombinace Ai a Bi
- kvadratický potenciál – LHO
- Morseho potenciál
  molekuly
  kdyžtak wikipedie



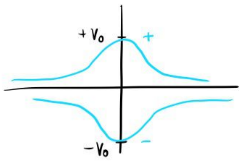
$$D\left(e^{-\alpha(x-x_0)} - 1\right)^2 - D$$

- delta jáma – limita pravoúhlé potenciálové jámy (zužujeme ji a zároveň zvyšujeme hloubku tak, aby se zachoval vázaný stav) $\psi(x)$ spojitá, $\psi'(x)$ má v místě jámy skok
- Woods-Saxonův potenciál
  řešení pomocí hypergeometrické funkce
  dá se analyticky napsat koeficient odrazu



$$V(x) = -\frac{V_0}{1+e^{\alpha x}}$$

- cosh bariéra $V(x) = \pm V_0 \left(\cosh(\alpha x)\right)^{-1}$
  hypergeometrická funkce



MQI-5 Částice ve třech dimenzích

12. 11. 2024

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z \quad \Rightarrow \quad \psi(x,y,z) = \psi(x_1,x_2,x_3) = \psi(\vec{x})$$

vektorová notace

1D … $L^2(\mathbb{R})$ → ve 3D vlastně $L^2(\mathbb{R}^3)$

$|x\rangle$ … $\psi(x) \in \mathcal{H}_x$

① ÚSKO $\{\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3\}$

operátor polohy $\hat{\vec{x}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$

$\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ komutují, každý působí v jiném prostoru direktního součinu

$$\left.\begin{aligned} \hat{x}_1 &= \hat{x} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \\ \hat{x}_2 &= \mathbb{1} \otimes \hat{x} \otimes \mathbb{1} \\ \hat{x}_3 &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \hat{x} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \text{společná báze } |x_1,x_2,x_3\rangle$$

$$\hat{x}_i |x_1,x_2,x_3\rangle = x_i |x_1,x_2,x_3\rangle$$

obecný stav $\quad |\psi\rangle = \int dx_1 \int dx_2 \int dx_3 \; \underbrace{\psi(x_1,x_2,x_3)} \, |x_1,x_2,x_3\rangle$

$\langle x_1,x_2,x_3|\psi\rangle = \langle \vec{x}, \psi\rangle$ vlnová funkce tří proměnných

$$\mathbb{1} = \int |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}| \, d^3x$$

$$\langle\vec{x}|\vec{x}'\rangle = \delta^3(\vec{x}-\vec{x}') = \delta(x_1-x_1')\,\delta(x_2-x_2')\,\delta(x_3-x_3') = \underbrace{\delta(r-r')\,\delta^2(r\vec{n}-r\vec{n}')}_{\text{sférické souřadnice}} = \frac{1}{r^2}\delta(r-r')\,\delta^2(\vec{n}-\vec{n}')$$

$\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$

operátor polohy vektorově napsaný: $\hat{\vec{X}} = \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \\ \hat{x}_3 \end{pmatrix}$

$$\hat{\vec{X}}\,\psi(\vec{x}) = \vec{x}\,\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} x_1\psi(\vec{x}) \\ x_2\psi(\vec{x}) \\ x_3\psi(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

② OPERÁTOR HYBNOSTI

analogicky pomocí direktního součinu

$$\begin{aligned} \hat{p}_1 &= \hat{p} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \\ \hat{p}_2 &= \mathbb{1} \otimes \hat{p} \otimes \mathbb{1} \\ \hat{p}_3 &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \hat{p} \end{aligned}$$

$\hat{p}_1\psi(\vec{x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\psi(\vec{x})$

v souřadnicové reprezentaci $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$

ÚSKO $\{\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3\}$ ⇒ báze $|p_1p_2p_3\rangle = |\vec{p}\rangle = |p_1\rangle \otimes |p_2\rangle \otimes |p_3\rangle$

v souřadnicové reprezentaci $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \varphi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{p}}$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p_1-p_1')\,\delta(p_2-p_2')\,\delta(p_3-p_3') = \frac{1}{p^2}\delta(p-p')\,\delta(\vec{n}-\vec{n}')$$

$$\psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int \frac{d^3x}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{p}}\,\psi(x)$$

v hybnostní reprezentaci: $\hat{\vec{x}} = i\hbar\nabla_{\vec{p}} \qquad \hat{\vec{p}} = \vec{p}$

komutační relace $\quad [\hat{x}_m, \hat{x}_n] = [\hat{p}_m, \hat{p}_n] = 0$

$\qquad [x_m, p_n] = i\hbar\,\delta_{mn}$

③ VOLNÁ ČÁSTICE ÚSKO ~ $\{\hat{H}_0, \hat{\vec{n}}\}$ kde $\hat{\vec{n}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{p}$, $\hat{n}_i = \frac{\hat{p}_i}{p} = \frac{\hat{p}_i}{\sqrt{\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2}}$

ve skutečnosti nezávislé jen dva $\hat{n}_i$, třetí se dopočte $\hat{n}_1^2+\hat{n}_2^2+\hat{n}_3^2 = \mathbb{1}$

– kinetická energie $\quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2}{2m} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta}_{\text{v souřadnicové reprezentaci}}$

$p^2 = p_x^2+p_y^2+p_z^2$ … číslo

vlastní stavy … vlastní stavy $\hat{\vec{p}}$ $\quad \hat{H}_0\,\varphi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \hat{H}_0|\vec{p}\rangle = \frac{p^2}{2m}|\vec{p}\rangle$

$p_E = \sqrt{2mE} \qquad \vec{p}_{E,\vec{n}} = p_E\,\vec{n}$ … $\underbrace{|E,\vec{n}\rangle = \eta\,|\vec{p}\rangle}_{\text{vlastní stavy našeho ÚSKO}}$

kde jiná normalizace, protože chceme $\langle E,\vec{n}|E',\vec{n}'\rangle = \delta(E-E')\,\delta^{(2)}(\vec{n}-\vec{n}')$

$$= |\eta|^2\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = |\eta|^2\delta(\vec{p}-\vec{p}') = |\eta|^2\delta(p-p')\,\delta^2(p(\vec{n}-\vec{n}')) = |\eta|^2\frac{p}{m}\delta(E-E')\frac{1}{p^2}\delta(\vec{n}-\vec{n}')$$

$p = \sqrt{2mE} \qquad \delta(f(x)) = \sum_{x_i}\frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|} \quad \Rightarrow |\eta|^2 = pm \quad \boxed{\eta = \sqrt{mp}}$

3.2.2025 – doplnění z videí

$$|E,\vec{n}\rangle = \sqrt{mp}\,|\vec{p}\rangle = \underbrace{\sqrt{\frac{mp}{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}\cdot\vec{n}\sqrt{2mE}}}_{\text{v x-reprezentaci}}$$

$p = \sqrt{2mE}$, $\vec{p} = \vec{n}\sqrt{2mE}$

pozn. $\mathcal{H}^{(3D)} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{S_2}$ … jiný způsob zavedení Hilbertova prostoru pro částici ve 3D

$\mathcal{H}_r$: energie kvantuje radiální složku, $\psi(r) \in L^2(0,\infty)$

$\mathcal{H}_{S_2}$: $\vec{n}$ kvantuje směr na sféře, $\psi(\vec{n}) \in L^2(S_2)$ – sféra jednotková

12.11.2024

(4) jiný ÚSKO $= \{\hat{H}_0, \hat{\vec{L}}\}$ = přesněji $\{H_0, \hat{L}_z, \hat{L}^2\}$

$\hat{\vec{L}}$ – orbitální moment hybnosti

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \qquad \hat{L}_k = \varepsilon_{klm}\, \hat{x}_l\, \hat{p}_m$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{1}$$
$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \delta_{\alpha\beta}\, i\hbar\mathbb{1} \quad \Rightarrow \quad [\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\, \hat{L}_\gamma$$

$$\begin{aligned}[L^2, L_1] &= [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \\ &= 0 + L_2[L_2, L_1] + [L_2, L_1]L_2 + L_3[L_3, L_1] + [L_3, L_1]L_3 \\ &= L_2(\cancel{-i\hbar L_3}) - \cancel{i\hbar L_3 L_2} + \cancel{L_3\, i\hbar L_2} + \cancel{i\hbar L_2 L_3} \\ &= 0\end{aligned}$$

obecně $[L^2, L_\alpha] = 0$

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_{S_2}$$

$\mathcal{H}_r \to \hat{A}$, $\mathcal{H}_{S_2} \to \hat{L}^2, \hat{L}_z$ $\Rightarrow$ ÚSKO? $\{\hat{A}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$

Přednáška 13

14.11.2024

Odbočka: kvantová teorie momentu hybnosti

obecná odbočka zahrnující kromě orbitálního momentu hybnosti i spin

Def. Momentem hybnosti nazveme trojici operátorů {Ĵ1, Ĵ2, Ĵ3}, které splňují komutační relaci

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\hbar\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma$$

$\hat{J}^2 = \hat{J}_1\hat{J}_1 + \hat{J}_2\hat{J}_2 + \hat{J}_3\hat{J}_3$

$[\hat{J}^2, \hat{J}_\alpha] = 0$ kvadrát komutuje s libovolnou ze složek

$\Rightarrow \exists$ společná sada vlastních vektorů

tohle je tam proto, aby kvantová čísla β, m byla bezrozměrná

$$\hat{J}^2 |\beta, m\rangle \overset{(*)}{=} \hbar^2 \beta\, |\beta, m\rangle$$
$$\hat{J}_z |\beta, m\rangle = \hbar m\, |\beta, m\rangle$$

označují ve skutečnosti vlastní vektory $|\alpha, \beta, m\rangle$ ... α je jedno nebo více kvantových čísel příslušejících radiální části Hilbertova prostoru nebo prostě jiným operátorům z ÚSKO, než jsou momenty hybnosti

to víme z (*)

$$\beta = \langle \beta, m| \frac{\hat{J}^2}{\hbar^2} |\beta, m\rangle = \langle \beta, m| \frac{\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2}{\hbar^2} |\beta, m\rangle + \underbrace{\langle \beta, m| \frac{\hat{J}_3^2}{\hbar^2} |\beta, m\rangle}_{\frac{m^2\hbar^2}{\hbar^2} |\beta, m\rangle} = \underbrace{\langle \beta, m| (\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2)/\hbar^2 |\beta, m\rangle}_{\text{tohle nevíme, ale } \hat{J}_1^2+\hat{J}_2^2 \text{ je pozitivně definitní operátor, takže to je } \geq 0} + m^2$$

$\Rightarrow \quad \beta \geq m^2 \geq 0$

zavedeme
$$\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2$$
$$\hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2 = \hat{J}_+^\dagger$$

pak platí
$$[\hat{J}_3, \hat{J}_+] = i\hbar \hat{J}_2 - i^2\hbar \hat{J}_1 = \hbar \hat{J}_+$$
$$[\hat{J}_3, \hat{J}_-] = -\hbar \hat{J}_-$$
$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_3$$

podobnost s komutačními relacemi u LHO?
$[\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+$
$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$
$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$

co to znamená pro spektrum?

$$\hat{J}_3 \left(\hat{J}_+ |\beta, m\rangle\right) = \underbrace{\hat{J}_+ \hat{J}_3 |\beta m\rangle}_{= \hat{J}_+ \hbar m |\beta m\rangle} + \underbrace{[\hat{J}_3, \hat{J}_+]}_{\hbar \hat{J}_+} |\beta, m\rangle = \hat{J}_+ \left(\hbar (m+1) |\beta, m\rangle\right) = \hbar(m+1) \left(\hat{J}_+ |\beta m\rangle\right)$$

tzn. $\hat{J}_+ |\beta m\rangle = C\, |\beta (m+1)\rangle$

konst. chceme najít tak, aby to bylo dobře normované

$\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ fungují jako zvyšovací/snižovací operátory

podobně $\hat{J}_- |\beta, m\rangle = C' \,|\beta (m-1)\rangle$

$$\| J_+ |\beta, m\rangle \|^2 = \langle \beta, m| \underbrace{J_+^\dagger J_+}_{= \hat{J}_- \hat{J}_+} |\beta m\rangle \quad (**)$$

odbočka: $\hat{J}_-\hat{J}_+ = (J_1 - iJ_2)(J_1 + iJ_2) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 - iJ_2J_1 + iJ_1J_2 = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + i\underbrace{[\hat{J}_1, \hat{J}_2]}_{= i\hbar\hat{J}_3}$

$$= \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3$$

zpět k (**) co je C? $\quad \| J_+ |\beta, m\rangle \|^2 = \hbar^2(\beta - m^2 - m) = C^2$

$$C = \hbar\sqrt{\beta - m(m+1)}$$

J_+ a J_- zvedají a snižují stavy v m

nedělají to ale jen omezeněkrát - může se nám stát, že $C = 0$

definujme si $j := m_{max}$ ... definované tak, že $J_+|\beta, j\rangle = 0$ tj. $\sqrt{\beta - j(j+1)} = 0$

$\beta = j(j+1)$

přeznačíme $|\beta, m\rangle = |j, m\rangle$

Takže $\hat{J}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle$

$J_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle$

podobně $J_-|jm\rangle = c'|j, m-1\rangle$

$$\| J_-|jm\rangle\|^2 = \langle jm| J_+J_- |jm\rangle = \langle jm | \underbrace{\hat{J}_-\hat{J}_+}_{= \hat{J}^2 - J_3^2 - \hbar J_3} + \underbrace{[\hat{J}_+, \hat{J}_-]}_{= 2\hbar\hat{J}_3} |jm\rangle = \hbar^2\left(j(j+1) - m^2 + m\right)$$

$$c' = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

$c' = 0 \iff j(j+1) = m_{min}(m_{min} - 1)$ 2 řešení: $m_{min} = \begin{cases} -j \\ j+1 > j = m_{max} \end{cases}$ takže tohle je blbost

„tím jsme završili zkoumání spektra"

j je nějaké, pak $m = \overbrace{-j, -j+1, \ldots, 0, \ldots, j-1, j}^{2j+1 \text{ hodnot}}$ ... interval délky $2j$ ... $2j$ je celé číslo

$\Rightarrow$ j je poločíselné $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$

SHRNUTÍ

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{J}^2|jm\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \\ \hat{J}_3|jm\rangle &= \hbar m|jm\rangle \\ \hat{J}_+|jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|j(m+1)\rangle \\ \hat{J}_-|jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|j(m-1)\rangle \end{aligned}}$$

Př spin 1/2 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{S}}$

$\sigma_j = \{\frac{1}{2}\}$ $j = \frac{1}{2}$ $m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \equiv |+\rangle$ $\quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |-\rangle$

$\hat{S}_z$ ... $\langle \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}| \hat{S}_z | \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ ... $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$

J_+, J_- ... v případě spinu 1/2 jsou odmocninové faktory vždy 1 nebo 0 17.11.2024

pomocí J_+ a J_- se dají vyjádřit J_1 a J_2 a tedy nalézt i druhé dvě Pauliho matice

OBECNĚJI částice se spinem $s = j$

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} s & & & & 0 \\ & s-1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -s+1 & \\ 0 & & & & -s \end{pmatrix}$$

matice operátorů J_1 a J_2 získáme z J_+ a J_-, tj. stačí znát maticové elementy J_+ (J_- je hermitovsky sdružený)

$$\langle jm | J_+ | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{m(m'+1)} \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

tj. $J_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \square & & \\ & 0 & \square & \\ & & \ddots & \square \\ & & & 0 \end{pmatrix}$ $\square$ = nenulová čísla nad diagonálou

částice se spinem $s = 1$

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

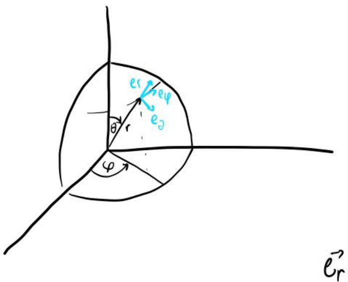
$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Zpět k orbitálnímu momentu hybnosti

$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}}$ $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ $j = ?$

$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times (-i\hbar \nabla)$ ← toto je v x-reprezentaci ... v p-reprezentaci má stejný tvar v příslušných proměnných

ve sférických souřadnicích



$x = r \sin\theta \cos\varphi$ $h_r = 1$
$y = r \sin\theta \sin\varphi$ $h_\theta = r$
$z = r \cos\theta$ $h_\varphi = r \sin\theta$

Laméovy koeficienty

$\vec{e}_r \times \vec{e}_\theta = \vec{e}_\varphi$
$\vec{e}_r \times \vec{e}_\varphi = -\vec{e}_\theta$

$$\vec{e}_r = \frac{\partial}{\partial r}(x, y, z) \qquad h_\theta \vec{e}_\theta = \frac{\partial}{\partial \theta}(x, y, z) \qquad h_\varphi \vec{e}_\varphi = \frac{\partial}{\partial \varphi}(x, y, z)$$

$$\vec{L} = \vec{x} \times (-i\hbar \nabla) = (r\vec{e}_r) \times \left(-i\hbar \left(\frac{1}{h_r} \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{h_\theta} \vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{h_\varphi} \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)\right)$$

$$= -i\hbar r \left(\frac{1}{r} \vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r\sin\theta} \vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i\hbar \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin\theta} \vec{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$= -i\hbar \left(\underbrace{\frac{1}{\cancel{r\sin\theta}} \begin{pmatrix} \cancel{r\sin\theta}(-\sin\varphi) \\ \cancel{r\sin\theta} \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}}_{\vec{e}_\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\cancel{r}\sin\theta} \begin{pmatrix} \cancel{r} \cos\theta \cos\varphi \\ \cancel{r} \cos\theta \sin\varphi \\ -\cancel{r} \sin\theta \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

ono to fakt vyjde

$$\begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\hbar \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\varphi \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}$$

Přednáška 14

19. 11. 2024

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

hledáme vlastní funkce $\hat{L}_z$ ve tvaru $\phi_{lm}(r,\theta,\varphi)$

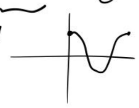
tj. chceme $\hat{L}_z\phi_{lm}(r,\theta,\varphi) = \hbar m\,\phi_{lm}(r,\theta,\varphi)$

protože $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, zřejmě se $\phi_{lm}(r,\theta,\varphi)$ musí v proměnné φ chovat jako exp

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\phi_{lm}(r,\theta,\varphi) = \hbar m\,\phi_{lm}(r,\theta,\varphi) \quad\Rightarrow\quad \phi_{lm}(r,\theta,\varphi) = c(r,\theta)\,e^{im\varphi}$$

navíc φ je cyklická proměnná – musí platit $\phi_{lm}(r,\theta,\varphi+2\pi) = \phi_{lm}(r,\theta,\varphi)$

$$e^{im\varphi}\underbrace{e^{im2\pi}}_{=1} = e^{im\varphi}$$



$m2\pi$ musí být celočíselný násobek 2π

$\Rightarrow m\in\mathbb{Z}$

z $m\in\mathbb{Z}$ vyplývá, že i $l\in\mathbb{Z}$ (teď už víme, že nemůže nabývat polocíselných hodnot)

odtud víme $\hat{L}^2\phi_{lm} = \hbar^2 l(l+1)\phi_{lm}$

$$\hat{L}^2 = (-i\hbar)^2\left[\vec{e}_\varphi\,\partial_\theta - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\partial_\varphi\right]\cdot\left[\vec{e}_\varphi\,\partial_\theta - \frac{\vec{e}_\theta}{\sin\theta}\partial_\varphi\right]$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

$$\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\theta} = 0 \qquad \frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = -\vec{e}_r$$

$$\frac{\partial\vec{e}_\varphi}{\partial\varphi} = -\vec{e}_r\sin\theta - \vec{e}_\theta\cos\theta$$

$$\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\varphi} = \cos\theta\,\vec{e}_\varphi$$

to pěkný na tom je, že tohle je úhlová část laplaciánu

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{(-\hbar^2)r^2}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(r^2\Delta - \frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2r\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

omezme se na úhlovou část vlastních funkcí – předpokládejme, že na r nezávisí

tj.

$$\langle\vec{x}|lm\rangle = Y_{lm}(x,y,z) = Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

chceme, aby splňovaly
$$\hat{L}_z Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$$
$$\hat{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

Odbočka: homogenní polynomy proměnných x, y, z

Def. Lineární kombinace výrazů $x^a y^b z^c$, kde $a,b,c\in\mathbb{N}_0$, nazvu polynomem.

Homogenní polynom stupně l je t. ž. $p(\lambda x,\lambda y,\lambda z) = \lambda^l p(x,y,z)$ $\Leftrightarrow$ p je lin. kombinace t. ž. $a+b+c=l$

bude značen p_l

Homogenní polynomy splňují
1) $p_l(x,y,z) = r^l f(\theta,\varphi)$
2) $\hat{L}_i\,p_l(x,y,z) = \tilde{p}_l(x,y,z)$ ← jiný homogenní polynom stupně l

$\hat{L}_i$ – libovolná složka momentu hybnosti (a tedy i kvadrát má tuto vlastnost)

3) $\Delta p_\ell(x,y,z) = \underline{f(\theta,\varphi)}\ \underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \underbrace{\frac{\partial}{\partial r} r^\ell}_{\ell r^{\ell-1}}}_{\ell(\ell+1) r^{\ell-2}} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} r^{\ell-2} \underbrace{f(\theta,\varphi)}_{\text{úhlová část se nemění}}$ 19.11.2024

$\Rightarrow$ pokud $\Delta p_\ell(x,y,z) = 0$, pak $\hat{L}^2 \underbrace{f(\theta,\varphi)}_{\text{toto jsou naše } Y_{\ell m}(\theta,\varphi)} = \hbar^2 \ell(\ell+1) f(\theta,\varphi)$

Kolik je p_ℓ tž. $\Delta p_\ell = 0$? $\quad p_\ell = LK\{x^a y^b z^c,\ a+b+c=\ell\}$

... kombinatoricky $\quad \circ \circ | \circ \ldots \circ | \circ \quad$ ℓ puntíků, 2 přepážky $\quad \frac{(\ell+1)(\ell+2)}{2}$

pro více ke sférickým harmonikám viz cvičení 8

Přednáška 15

21.11.2024

zatím jsme v Hilbertově prostoru nalezli následující užitečné báze — vl. vektory těchto ÚSKO:

1) $\{\hat{\vec{x}}\}$
2) $\{\hat{\vec{p}}\}$
3) $\{\hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m},\ \hat{\vec{n}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|}\}$
4) $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ — sférické harmoniky

pokračujeme (řešíme konkrétní třetí operátor do ÚSKO k L^2 a L_z)

5a) $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ v p-reprezentaci $\quad |Elm\rangle \quad \Phi_{Elm}(\vec{p}) = \langle \vec{p}|Elm\rangle$ ... vlnová funkce v p-reprezentaci

přičemž
$\hat{H}_0|Elm\rangle = E|Elm\rangle$
$\hat{L}^2|Elm\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1)|Elm\rangle$
$\hat{L}_z|Elm\rangle = \hbar m|Elm\rangle$

pozn., kterou neumím úplně zařadit: L^2, L_z mají v p i x reprezentaci stejný tvar, takže i v p-reprezentaci jsou úhlové části sférické harmoniky

$|Elm\rangle \ldots \quad \Phi_{Elm}(\vec{p}) = R_{\ell m}(p)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ ... vlnová funkce v p-reprezentaci ve sférických souřadnicích

velikost hybnosti ... radiální část

víme $\frac{\hat{p}^2}{2m}|Elm\rangle = \frac{p^2}{2m}|Elm\rangle \Rightarrow$ radiální část je δ funkce $\quad \delta(E - \frac{p^2}{2m})$

normalizace

$\Phi_{Elm}(\vec{p}) = \mathcal{N}\,\delta(p-p_E)\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ kde $p_E = \sqrt{2mE}$

$\mathcal{N}$ normalizační konst.

$\langle Elm|E'\ell'm'\rangle = \delta(E-E')\,\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$$\int_0^\infty dp \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta\ p^2 \sin\theta\ \Phi_{Elm}(\vec{p})\, \Phi^*_{E'\ell'm'}(\vec{p})$$

$$= \int dp \int d\varphi \int d\theta\, \mathcal{N}^2 p^2 \sin\theta\ \delta(p-p_E)\,\delta(p-p_E')\ \underbrace{Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\, Y^*_{\ell'm'}(\theta,\varphi)}_{\text{sférické harmoniky navzájem ortogonální}}$$

z toho $\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$

$$\int dp\ p^2 \mathcal{N}^2 \delta(p-p_E)\,\delta(p-p_E') = \mathcal{N}^2 p_E^2\ \delta(p_E - p_E') = \mathcal{N}^2 p_E^2 \frac{m}{p_E}\ \delta(E-E') \stackrel{\text{chci}}{=} \delta(E-E')$$

$\delta(f(x)) = \sum \frac{\delta(x)}{|f'(x)|} \quad E = \frac{p^2}{2m} \quad E'(p) = \frac{p}{m} \quad \delta(p_E - p_E') = \frac{\delta(E-E')}{p/m}$

$\mathcal{N}^2 p_E m = 1 \Rightarrow \mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{p_E m}}$

správná normalizace: $\boxed{\Phi_{Elm}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{p_E m}}\ \delta\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{p}}{p}\right)}$

5b) $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ v souřadnicové reprezentaci $\langle \vec{x} | Elm \rangle = \phi_{Elm}(r,\theta,\varphi) = N\, R(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 21. 11. 2024

mmmm něco něco záhadná Besselova funkce

pozor, padá z nebe:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} i^l \underbrace{j_l(kr)}_{\text{sférická Besselova funkce}} Y^*_{lm}\left(\frac{\vec{k}}{k}\right) Y_{lm}\left(\frac{\vec{x}}{r}\right) \qquad k_E = \frac{p_E}{\hbar}$$

označení: $|Elm\rangle \equiv |klm\rangle$

$$\psi_{klm}(\vec{x}) = \langle \vec{x} | klm \rangle = R_{kl}(r)\, Y_{lm}\left(\frac{\vec{x}}{r}\right)$$

$$\langle klm | k'l'm' \rangle = \int d\Omega \int dr\, r^2\, R^*_{kl}(r)\, Y^*_{lm}(\vec{r})\, R_{k'l'}(r)\, Y_{l'm'}(\vec{r})$$

dá se separovat úhlová a radiální část

$$\left(\int d\Omega\, Y^*_{lm}(\vec{r})\, Y_{l'm'}(\vec{r})\right)\left(\int dr\, r^2 R^*_{kl}(r)\, R_{k'l'}(r)\right)$$

dále už jen radiální

substituce $\boxed{\chi_{kl} = r R_{kl}(r)}$ tzn. $\int \chi_{kl}(r)\, \chi_{k'l'}(r)\, dr$

pak $\phi_{klm}(\vec{r}) = \frac{1}{r} \chi_{kl}(r)\, Y_{lm}(\vec{n}) \qquad \vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$

$$\hat{H}_0 \phi_{klm}(\vec{r}) = E\, \phi_{klm}(\vec{r})$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Delta_r - \frac{L^2}{\hbar r^2}\right)$$

$$\hat{H}_0 \phi_{klm}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\cancel{\hbar^2}} \cancel{\hbar}\, l(l+1)\right) \phi_{klm}(\vec{r})$$

$\frac{1}{r}\chi_{kl}(r)\, \cancel{Y_{lm}(\vec{n})}$ $\qquad \frac{1}{r}\chi_{kl}(r)\, \cancel{Y_{lm}(\vec{n})}$

$$-\frac{1}{r}\frac{2mr^2}{\hbar^2} E\, \chi_{kl} = \frac{2\cancel{r}}{\cancel{r}}\chi'_{kl}(r) + \frac{\cancel{r^2}}{\cancel{r}}\chi''_{kl}(r) - \frac{l(l+1)}{r}\chi_{kl}(r)$$

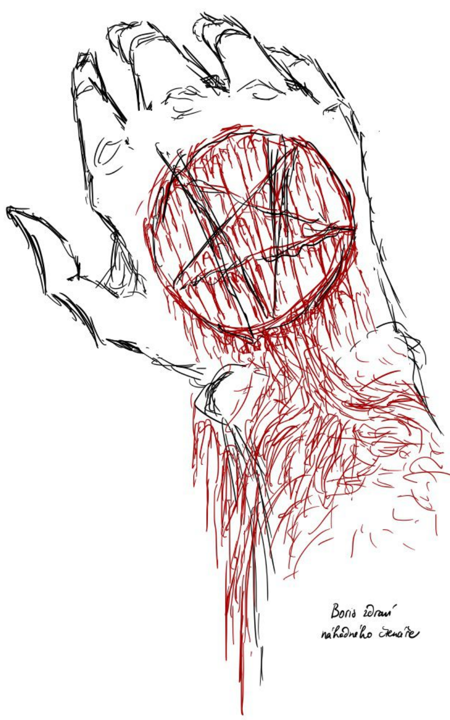
$$- 2\cancel{r}\frac{1}{\cancel{r^2}}\chi_{kl}(r) - \cancel{r^2}\frac{1}{2r^3}\chi_{kl}(r)$$

$$-\frac{2mr}{\hbar^2} E\, \chi_{kl} = -\left(\frac{l(l+1) + 2 + \frac{1}{2}}{r}\right)\chi_{kl}(r) + 2\chi'_{kl}$$

pardon

má z toho vylézt $\chi''(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi(r) = 0$

tady nějakej podstatnej kus ke konci přednášky chybí



Boris zdraví náhodného čtenáře

5b) $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ v souřadnicové reprezentaci 4.2.2025 ze záznamu

- proč bychom to měli chtít řešit?
  - volná částice je startovací model
  - konstrukce modelů z po částech konstantních potenciálů
    - např. kulatá potenciálová jáma

známe $\varphi_{Elm}(\vec{p})$ ... přechod do x-reprezentace je přece jen

$$\varphi_{Elm}(\vec{x}) = \int d^3p \underbrace{\langle \vec{x}|\vec{p}\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}} \underbrace{\langle \vec{p}|Elm\rangle}_{\varphi_{Elm}(\vec{p})} \Rightarrow \text{vede na Fourierovu transformaci}$$

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} i^l j_l(kr)\, Y^*_{lm}(\vec{x})\, Y_{lm}(\vec{x})$$ ← zápis rovinné vlny ve sférických souřadnicích

j_l ↓ sférické cylindrické funkce = sférické Besselovy funkce

i^l: posun fáze sférických harmonik

$$Y_{lm}(\vec{x}) \xrightarrow[\text{k p-reprezentaci}]{\text{přechod}} i^l Y_{lm}(\vec{p})$$

nalezení $|Elm\rangle$ v x-reprezentaci

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k_E = \frac{p_E}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$ vlnový vektor $\vec{k}$ místo $\vec{p}$

naše ÚSKO je $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ $\Rightarrow$ $\varphi_{klm}(\vec{x}) = R_{kl}(r)\, \underline{Y_{lm}(\theta, \varphi)}$

Y_{lm}: víme, že úhlová část jsou sférické harmoniky, protože máme v ÚSKO L^2 a L_z

R_{kl}: nezávisí na m, protože přechod k jiným m je pomocí $L_\pm$, které působí jen na úhlovou část

zavedení radiální vlnové funkce

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \underbrace{\int \underline{\underline{r^2}} dr\, R_1^*(r) R_2(r)} \int d\Omega\, Y_1^*(\Omega) Y_2(\Omega)$$

zavedeme $\boxed{\chi_1 = r R(r)}$ $\Rightarrow$ $= \int_0^\infty \chi_1^*(r)\chi_2(r)\, dr$ ... obyčejný skalární součin v $L^2(0,\infty)$ (nestrpí tam r^2)

$$\varphi_{klm}(\vec{x}) = \frac{1}{r}\chi_{kl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$H_0 \varphi_{klm}(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \varphi_{klm} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\right]\varphi_{klm} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r} r^2\frac{\partial}{\partial r} - l(l+1)\right]\varphi_{klm}$$

$$\overset{\|}{\frac{p^2}{2m}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad\Rightarrow\quad k^2 \frac{1}{r}\chi_{kl}(r) = -\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - l(l+1)\right)\frac{1}{r}\chi_{kl}(r)$$

tato rovnice vznikla vykrácením úhlové části

vede na $\frac{d^2}{dr^2}\chi_{kl}(r)$

$$\boxed{\chi''(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi(r) = 0}$$ radiální Schrödingerova rovnice (rSR)

toto je pro volnou částici; pro sféricky symetrický potenciál lze taky napsat

$$\chi''(r) + \left(k^2 + \frac{2mV}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\chi(r) = 0$$

↳ centrifugální člen - něco takového již v Keplerově úloze

$l=0$ ... jako 1D volná částice $\chi(r) = A\sin(kr) + \cancel{B\cos(kr)}$

navíc požadujeme $\psi(r=0) = 0 \Rightarrow$ cosinus se škrtá

$\ell > 0$ řešení — diferenciální rovnicí / algebraicky pomocí něčeho jako posunovacích operátorů

4.2. 2025

stále bez potenciálu

$$\chi''(r) + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\chi(r) = 0$$

$$\chi = r R(r) \qquad \chi' = R(r) + r R'(r)$$

$$R'(r) + R'(r) + r R''(r) + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) r R(r) = 0$$

$$R''(r) + \frac{2}{r} R'(r) + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) R(r) = 0$$

$$R_{k\ell}(r) = j_\ell(kr)$$

$$k^2 j_\ell''(kr) + \frac{2k}{r} j_\ell'(kr) + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) j_\ell(kr) = 0$$

$$j_\ell''(kr) + \frac{2}{kr} j_\ell'(kr) + \left(1 - \frac{\ell(\ell+1)}{k^2 r^2}\right) j_\ell(kr) = 0$$

znovu přejděme k $R(r) = \frac{1}{r}\chi(r)$

bez potenciálu je možné k

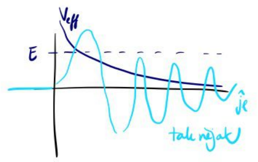
přímo $R_{k\ell}(r) = j_\ell(kr) = j_\ell(z)$ bezrozměrná proměnná z

Dostáváme rovnici $\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z}\frac{d}{dz} + 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{z^2}\right) j_\ell(z) = 0$ ← to je ono

lze namísto toho zavést $\hat{j}_\ell(z) = z\, j_\ell(z)$ Riccatti-Besselovy funkce

splňují radiální Schrödingerovu rovnici s potenciálem $-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$

$$\underset{(*)}{\hat{j}_\ell''(z)} + \left(1 - \underset{(**)}{\frac{\ell(\ell+1)}{z^2}}\right)\hat{j}_\ell(z) = 0$$



$z \to 0$, kolem 0 Taylorův rozvoj $\hat{j}_\ell(z) \sim z^\alpha + O(z^\alpha)$

$\hat{j}_\ell'' \dots \underset{(*)}{\alpha(\alpha-1)}\, \cancel{z^{\alpha-2}} - \underset{(**)}{\ell(\ell+1)\, \cancel{z^{\alpha-2}}} = 0$ $\quad \alpha = \begin{cases} \ell+1 \\ -\ell \end{cases}$ tzn. $\hat{j}_\ell(z) \sim \begin{cases} z^{\ell+1} \\ \frac{1}{z^\ell} \end{cases}$ ... diverguje v počátku => zakážu a zahodím

$$\hat{j}_\ell(z) = z^{\ell+1}\varphi(z) \qquad \hat{j}_\ell'(z) = z^{\ell+1}\varphi'(z) + (\ell+1) z^\ell \varphi(z)$$

$$\hat{j}_\ell''(z) = z^{\ell+1}\varphi''(z) + (\ell+1)z^\ell \varphi'(z) + (\ell+1) z^\ell \varphi'(z) + (\ell+1)\ell\, z^{\ell-1}\varphi(z)$$

$$\Rightarrow \varphi''(z) + \frac{2}{z}(\ell+1)\varphi' + \varphi = 0 \qquad \dots\ \ell = 0 \Rightarrow \varphi_0(z) = \frac{\sin(z)}{z}$$

pozorování: $\psi = \frac{\varphi'}{z} \quad \dots \quad \psi'' + \frac{2(\ell+2)}{z}\psi' + \psi = 0$

$$\psi' = \frac{\varphi''}{z} - \frac{1}{z^2}\varphi' = -\frac{1}{z}\left(\frac{2}{z}\ell(\ell+1)\varphi' + \varphi + \frac{1}{z}\varphi'\right)$$

$$\psi'' = \frac{1}{z^2}\left(\frac{2\ell(\ell+1)+1}{z}\varphi' + \varphi\right) - \frac{1}{z} \quad \dots \text{ fujky ale}$$

prostě to vede na to, že z φ_ℓ se dá získat jako $\underbrace{\varphi_{\ell+1}(z) = \psi(z) = \frac{1}{z}\frac{d}{dz}\varphi_\ell(z)}_{\text{můžeme generovat další } \ell}$

závěr: $R_{k\ell}(r) = j_\ell(kr) = \frac{\hat{j}(kr)}{kr} = (kr)^\ell \varphi(kr)$

$R_{k\ell}(r) = C \cdot j_\ell(kr)$

$$\boxed{j_\ell(z) = (-1)^\ell z^\ell \underbrace{\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell}_{\text{operátor pro generaci vyšších } \ell} \underbrace{\frac{\sin z}{z}}_{\varphi_0}}$$

sférická cylindrická Besselova funkce

regulární v počátku

pro napojování řešení při nějakých sférických problémech

jsou někdy potřeba i řešení neregulární v počátku (v oblastech, co počátek neobsahují)

$$n_\ell(z) = (-1)^{\ell+1} z^\ell \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell \frac{\cos z}{z}$$

Neumannova sférická cylindrická funkce

neregulární v počátku

jsou to řešení sféricky symetrického problému pro volnou částici (?)

pro chování v ∞ jsou relevantní jen členy, kde se derivuje sinus/kosinus (ty ostatní rychle ubývají)

↳ konec rozptylu

Přednáška 16

26. 11. 2024

$$j_\ell(z) = (-1)^\ell z^\ell \left[\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right]^\ell \frac{\sin(z)}{z} \qquad \hat{j}_\ell(z) = z\, j_\ell \qquad n!! = n(n-2)(n-4)\dots$$

$$n_\ell(z) = (-1)^{\ell+1} z^\ell \left[\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right]^\ell \frac{\cos(z)}{z} \qquad \hat{n}_\ell(z) = -\, z\, n_\ell$$

asymptotické chování: $z \to 0 \qquad j_\ell(z) \cong \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!} \qquad n_\ell(z) \cong \frac{(2\ell+1)!!}{z^{\ell+1}}$

$$z \to \infty \qquad j_\ell(z) \cong \frac{1}{z}\sin\left(z - \frac{\pi}{2}\ell\right) \qquad n_\ell(z) \cong -\frac{1}{z}\cos\left(z - \frac{\pi}{2}\ell\right)$$

použití pro teorii rozptylu – je to ~ sinus a cosinus

toto ↑ jsou sférické Besselovy funkce

standardní Besselovy funkce jsou cylindrické a značí se velkými písmeny

souvislost:

$$j_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, J_{\ell+\frac{1}{2}}(z) \qquad n_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, N_{\ell+\frac{1}{2}}(z)$$

normování

$$\int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r)\, r^2\, dr = \frac{\pi}{2k^2}\,\delta(k-k')$$

chtěli bychom normování na δ funkci

z tabulek – dá se nějak ověřit/odvodit, ale to se nebude zkoušet

závěr: hledaná, správně normovaná funkce je $\psi_{klm}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, k\, j_\ell(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$$\langle \psi_{klm} | \psi_{k'l'm'} \rangle = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,\delta(k-k')$$

$$\psi_{Elm}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}\, j_\ell(kr)\, Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad \langle \psi_{Elm} | \psi_{E'l'm'} \rangle = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,\delta(E-E')$$

substituce v δ funkci

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi \sum_\ell \sum_m i^\ell\, j_\ell(\vec{k})\, Y_{lm}(\vec{r})$$

na tohle se dá dívat tak, že jsme to dostali jako $\langle x | \underbrace{\int \sum_\ell \sum_m |klm\rangle\langle klm|\, k^2 dk}_{\mathbb{1}} | p \rangle = \langle x | p \rangle$ tzn. vlnová funkce rovinné vlny

Částice ve sférickém poli

$$V(\vec{r}) = V(r) \quad \rightarrow \quad [\hat{L}_\alpha, \hat{V}(r)] = 0$$

jako ÚSKO volíme $\{\underset{\hat{H}_0 + \hat{V}(r)}{\overset{\shortparallel}{\hat{H}}}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$

$$\hat{H}|Elm\rangle = E|Elm\rangle \qquad \psi_{Elm}(\vec{r}) = \langle \vec{x} | Elm \rangle = R_{El}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

↓

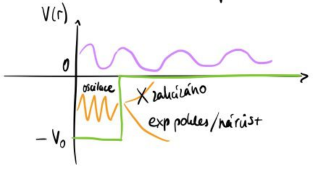
$$-\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}}\, \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \ell(\ell+1)\right) R_{kl}(r) + \underbrace{V(r)}_{\cancel{\frac{\hbar^2}{2m}} U} R_{kl}(r) = E R_{kl}(r) = \frac{(\cancel{\hbar} k)^2}{\cancel{2m}} R_{El}$$

26. 11. 2024

$$R''_{kl}(r) + \frac{2}{r} R'_{kl}(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right) R_{kl}(r) = 0$$

$$\chi''(r) + \left(k^2 - \underset{U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}}{\underbrace{U_{eff}(r)}} \right) \chi(r) = 0$$

Př. sférická jáma

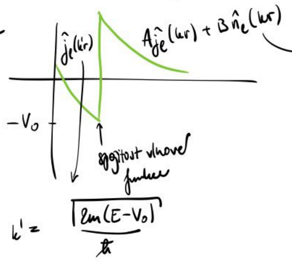


$r \in \langle 0, \infty)$

víme $\chi(r=0) = 0$

obrázek pro $l = 0$

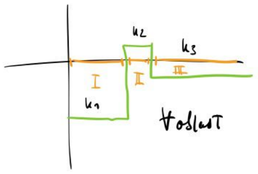
jinak



$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Řešitelné potenciály A) po částech konst. potenciál



V oblasti $A_i \hat{j}_l(k_i r) + B_i \hat{n}_l(k_i r)$

pokud $E < V_i \ldots \quad k = \varkappa i$ (imaginární)

$l=0 \quad \hat{j}_0 = \sin kr \qquad \hat{n}_0 = \cos kr$

Ricatti-Hankelovy funkce

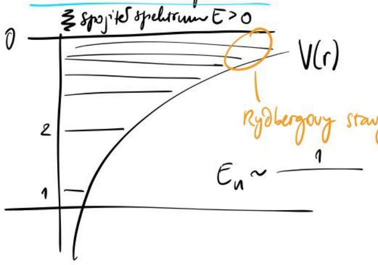
$$h_l^+(kr) = \hat{n}_l(kr) + i\,\hat{j}_l(kr) \sim e^{ikr} = e^{-\varkappa r}$$

$$h_l^-(kr) = \text{—〃—} - \text{—〃—} \sim e^{-ikr} = e^{\varkappa r}$$

$\Downarrow$

pro $r \to \infty$ chceme, aby naše řešení šlo k $h_l^+(kr)$ (klesající řešení)

B) coulombické pole $\quad V = \frac{\gamma}{r}$

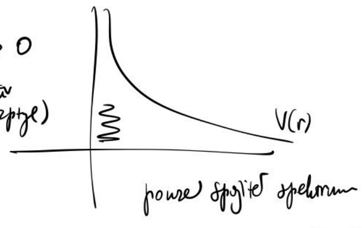


$\gamma < 0$ (elektrony v atomu)

Rydbergovy stavy - velmi slabě vázané

$E_n \sim \frac{1}{\quad}$

$\gamma > 0$ (Rutherfordův rozptyl)



pouze spojité spektrum

spink spink spink spink spink spink spink spink spink spink

algebraické řešení: jde pro vysoce symetrické případy

skryté symetrie coulombického pole Runge-Lenzův vektor ... směr hlavní poloosy eliptické orbity

a tady to zase chybí 😴

něco něco obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu s nekonstantními koeficienty – rovnice s polynomiálními koeficienty (což zde vyjde) jsou klasifikované, zabýval se jimi Gauss (kdo jiný), řeší to něco, čemu se říká hypergeometrická funkce (kdyžtak podrobněji: Formánkovy dodatky)

Coulombický potenciál – ATOM VODÍKU

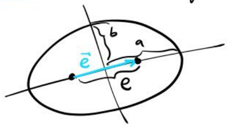
5.2.2025 - ze záznamu

přitažlivý $V = \frac{\gamma}{r}$ $\quad \gamma < 0$

motivace - reálně se vyskytuje v přírodě (atom vodíku, vodíku podobné ionty, mionový atom vodíku, pozitronium $e^+ - e^-$, protonium $p^- - p$, antivodík $p^- - e^+$)

idealizace: centrum $M \gg m$, "$M \to \infty$", považujeme centrum za nehybné
(můžeme se tam dostat přechodem do těžišťového systému, takže vlastně BÚNO)

symetrie atomu vodíku **Rungeův-Lenzův vektor** $\vec{A} = \vec{p} \times \vec{L} - m\gamma \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} = m\gamma \vec{e}$ ← excentricita



$\vec{e}$ se zachovává (v klasické mech.) - elipsy jsou v keplerově úloze neměnné, trajektorie se v prostoru nehýbou

i v QM se dá ukázat, že $\hat{\vec{e}}$ komutuje s $\hat{H}$

$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ ... separace rovnice ve sférických souřadnicích
⇒ úhlová část sférické harmoniky, radiální chceme najít
ale díky zachovávání $\vec{e}$ se dá separovat i v parabolických nebo eliptických souřadnicích

Řešení, tj. nalezení $|Elm\rangle$ ... $\psi_{Elm}(\vec{x})$

$$\underbrace{r\chi_{El}(r)}_{R_{El}(r)} Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

sférická Schrödingerova rovnice

$$\boxed{\chi''(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{|\gamma|}{r} - \frac{\hbar\, l(l+1)}{2mr^2}\right)\chi(r) = 0}$$

je tu ve skutečnosti $-V(r) = -\left(\frac{-|\gamma|}{r}\right)$

přechod k bezrozměrné proměnné $\rho = \beta r$, kde $\beta = 1/\text{char. délka}$ ... $\chi(r) = u(\rho)$

$$u''(\rho) + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2\beta^2}}_{-\frac{1}{4}} u + \underbrace{\boxed{\frac{2m|\gamma|}{\hbar^2\beta}}}_{=\lambda}\frac{u}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u = 0$$

volíme β tak, aby toto bylo $-\frac{1}{4}$ ... $E = -|E| < 0$ vázané stavy

$$\beta = \frac{\sqrt{8m|E|}}{\hbar} \qquad \lambda = \frac{2m|\gamma|}{\hbar\sqrt{8m|E|}} \qquad \lambda^2 = \frac{4m^2\gamma^2}{\hbar^2\, 8m|E|} = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2|E|}$$

$$\boxed{u''(\rho) + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u = 0} \quad (*)$$

je to radiální Schrödingerova rovnice
podobná analýza jako bez potenciálu ... pro $\rho \to 0$ se chová jako $u(\rho) \begin{cases} \rho^{l+1} \\ \rho^{-l} \end{cases}$ ... zahodíme kvůli požadavku na regularitu v počátku
vytáhneme asymptotiku

$\rho \to \infty$ dostáváme $u'' = \frac{1}{4}u$ ⇒ $u(\rho) = e^{\pm\frac{\rho}{2}}$ chceme integrovatelné řešení
protože vázaným stavům odpovídají stavy z L^2
zahodíme + a máme jen $u(\rho) = e^{-\rho/2}$

píšeme $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} w(\rho)$

Dosazením do rovnice (*) dostaneme rovnici pro $w(\rho)$ $\quad \rho w'' + (2l+2-\rho)w' + (\lambda - (l+1))w = 0$
nekonstantní koeficienty

ODR s polynomiálními koef. se dají převést na Gaussovu rovnici

$$z(1-z)\bar{w}'' + (c - (1+a+b)z)\bar{w}' - ab\,\bar{w} = 0$$

dá se řešit pomocí řady (porovnání člen po členu)   obecný člen $\frac{a(a+1)\dots(a+k-1)\, b(b+1)\dots(b+k-1)}{c\dots(c+k-1)} \frac{z^k}{k!}$

řešení takové rovnice = hypergeometrická funkce $F(a,b,c,z) = 1 + \frac{ab}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!}$

Gaussova rovnice má 2 LNZ řešení $\quad \tilde{w}_1(\rho) = F(a,b,c,\rho)$ 5.2.2025

$$\tilde{w}_2(\rho) = \rho^{1-c} F(1+a-c, 2-c, \rho) \quad \ldots \text{ singulární v počátku}$$

Degenerovaná Gaussova rovnice $\quad \rho w'' + (c-\rho) w' - aw = 0 \quad \ldots$ to je náš případ

řešení se dostane jako

$$F(a,c,\rho) = \lim_{b\to 0} F\left(a,b,c,\frac{\rho}{b}\right)$$

dostaneme z toho řešení

$$w_1 = F(a,c,\rho) = 1 + \frac{1}{1!}\frac{a}{c}\rho + \frac{1}{2!}\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\rho^2 + \ldots$$

$$w_2 = \rho^{1-c} F(1+a-c, 2-c, \rho) \quad \ldots \text{ singulární v počátku, zahodíme}$$

tohle je to, co chceme

w_1 pro $\rho \to \infty$ se chová jako e^{ρ} $\Rightarrow$

řešení je $\quad u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho/2} w_1(\rho) \qquad$ PROBLÉM (u není L^2)

z požadavku $u \in L^2$ dostáváme, že řada w_1 musí mít jen konečný počet členů

$\Rightarrow \quad a \in \mathbb{Z}_0^-$ celá záporná čísla (aby se členy od nějakého dál vynulovaly)

$a = -\nu \qquad \nu \in \mathbb{N}_0$

zároveň $\quad -a = \nu = \lambda - (\ell+1)$

$\lambda = \ell + 1 + \nu =: n \qquad$ HLAVNÍ KVANTOVÉ ČÍSLO

λ souvisí s energií $\qquad n > 0$

$$\lambda^2 = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2|E|} \qquad E = -|E| = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2(\ell+1+\nu)^2}$$

$$R = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

$$\boxed{E_n = -\frac{R}{n^2}}$$

hladiny atomu vodíku

pro atom vodíku se značí $R_y = 13{,}6\ \text{eV}$ ... Rydbergova konstanta (typická energie)

n ... hlavní kvantové číslo $\quad n = 1, 2, \ldots$

ν ... radiální kvantové číslo – význam: řád polynomu $\quad F(-\nu, 2(\ell+1), \rho)$

pro dané n je $\ell = 0, 1, \ldots, n-1$

pak $m = -\ell, \ldots, \ell$

pro dané n máme $\quad \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2 \quad \ldots$ degenerace energetické hladiny E_n

radiální část

napíšeme vlnovou funkci $\quad R_{n\ell} = \beta r \, (\beta r)^{\ell+1} e^{-\beta r/2} F(-\nu, 2(\ell+1), \beta r)$

$$\rho = \beta r \qquad \beta = \frac{\sqrt{2m|E_n|}}{\hbar} = \frac{2m|\gamma|}{\hbar^2 n} = \frac{2}{an}$$

$$\rho = \frac{2r}{na}$$

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e_0^2} \qquad \text{Bohrův poloměr atomu vodíku}$$

$\sim 0{,}5\,\text{Å}$ (typická velikost atomu)

3. 12. 2024

Přednáška 17

zápočtová písemka

- vyplnit klikátko v SISu
- ideologicky podobné trochu jako úkoly
- koncipováno tak, že je relativně náročné to opravdu stihnout v daném čase
- na zápočet ale stačí docela málo bodů, pokud člověk dělal domácí úkoly
- při dobrém výsledku se odpouští zkoušková písemka

Pokračování centrální coulombické pole – Gaussova rovnice, hafo substitucí a řešení pomocí řady => radiální kvantové číslo.

Závěr, shrnutí:

$$\rho = \frac{2r}{na} \qquad a = \left(\frac{m|\gamma|}{\hbar^2}\right)^{-1} \approx 0{,}53\ \text{Å}$$

při dosazení hodnot pro atom vodíku je toto Bohrův poloměr

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \underbrace{\left(\frac{2r}{na}\right)^l}_{\rho^l} \underbrace{F(-\nu, 2(l+1), \rho)}_{\text{(zobecněný) Laguerův polynom}} e^{-\rho/2}$$

(řada definující degenerovanou hypergeometrickou funkci degeneruje na polynom)

Laguerovy polynomy

$$L_n^\alpha(x) = \binom{n+\alpha}{n} F(-n, \alpha+1, x)$$

Laguerovy polynomy jsou zase nějaké OG polynomy

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\, a^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_\nu^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) e^{-\frac{r}{na}}$$

Existují nějaké generující funkce, ale při skutečném počítání spíš bereme funkce z tabulek.

$$R_{10}(r) = 2\sqrt{\frac{1}{a^3}}\, e^{-\frac{r}{a}} \qquad \text{(zákl. stav)}$$

$$R_{20}(r) = \sqrt{\frac{1}{2a^3}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6a^3}}\, \frac{r}{a}\, e^{-\frac{r}{2a}}$$

generující funkce

$$s(t,x) = \frac{1}{(1-t)^{a+1}} e^{-\frac{xt}{1-t}} = \underbrace{\sum_n L_n^a(x)\, t^n}_{\text{taylorův rozvoj v } t}$$

příslušné Laguerovy polynomy

Skládání momentu hybnosti

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] \overset{⊛}{=} i\hbar\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma$$

$$\hat{J} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) \qquad \hat{J}^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle \qquad j \in \{0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots\}$$

existují operátory $\hat{J}_\pm$

$$\hat{J}_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle \qquad m = \{-j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j\}$$

$2j+1$ hodnot

představme si, že máme hilbertův prostor jako direktní součin $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, kde na $\mathcal{H}^{(1)}$ působí $\hat{J}_\alpha^{(1)}$ a na $\mathcal{H}^{(2)}$ působí $\hat{J}_\beta^{(2)}$

celkový moment hybnosti: $\hat{J}_\alpha = \hat{J}_\alpha^{(1)} + \hat{J}_\alpha^{(2)}$ (vektorový součet po složkách)

potože $[\hat{J}_\alpha^{(1)}, \hat{J}_\beta^{(1)}] = i\hbar\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma^{(1)}$ a $[\hat{J}_\alpha^{(1)}, \hat{J}_\beta^{(2)}] = 0$, platí pro takto definovaný moment hybnosti komutační relace momentu hybnosti ⊛

rádi bychom v $\mathcal{H}$ nalezli vlastní čísla a vlastní vektory celkového momentu hybnosti

z ⊛ plyne, že $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ ... mají společnou bázi vl. vektorů separovaná báze v $\mathcal{H}$ ... $|j_1 m_1 a_1\rangle \otimes |j_2 m_2 a_2\rangle$ ... ÚSKO $\{\hat{J}^{(1)2}, \hat{J}_z^{(1)}, \hat{J}^{(2)2}, \hat{J}_z^{(2)}, \hat{A}_1, \hat{A}_2\}$ 3.12.2024

dodatečná kvantová čísla – dále je budeme vypouštět

separovaná báze neobsahuje vl. funkce $\hat{J}^{(1)2}, \hat{J}_z^{(1)}, \hat{J}^{(2)2}, \hat{J}_z^{(2)}$

hledáme kaplovanou (coupleovanou?) bázi $\mathcal{H}$ takovou, aby obsahovala vl. vektory $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$

$\hat{J}^2, \hat{J}_z$ není samo o sobě ÚSKO (málo operátorů)

ukáže se, že vhodným ÚSKO je $\{\hat{J}^{(1)2}, \hat{J}^{(2)2}, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$

ÚSKO, zavřu se do pokoje
ÚSKO, kvantová čísla jsou to moje
funkce normuji
kdyžuž noc se kráti

skutečně tyto operátory komutují? jak působí na vlastní vektory?

$$\hat{J}_z = \hat{J}_z^{(1)} + \hat{J}_z^{(2)} \qquad [\hat{J}_z, \hat{J}_z^{(1)}] = 0$$

$$\hat{J}_z\left(|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle\right) = \underbrace{(m_1 + m_2)}_{M \text{ kvantové číslo}} |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$$

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{\vec{J}}^{(1)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}\right)^2 = \hat{\vec{J}}^{(1)2} + \underbrace{\hat{\vec{J}}^{(1)}\cdot\hat{\vec{J}}^{(2)} + \hat{\vec{J}}^{(2)}\cdot\hat{\vec{J}}^{(1)}}_{= 2\hat{\vec{J}}^{(1)}\cdot\hat{\vec{J}}^{(2)} = 2\left(\hat{J}_x^{(1)}\hat{J}_x^{(2)} + \hat{J}_y^{(1)}\hat{J}_y^{(2)} + \hat{J}_z^{(1)}\hat{J}_z^{(2)}\right)} + \hat{\vec{J}}^{(2)2}$$

... $\hat{J}^2$ nemusí komutovat s $\hat{J}_z^{(1)}, \hat{J}_z^{(2)}$

ale $[\hat{J}^2, \hat{J}^{(1)2}] = 0$

$$\hat{J}^2 = \hat{J}^{(1)2} + \hat{J}^{(2)2} + 2\hat{J}_z^{(1)}\hat{J}_z^{(2)} + \hat{J}_+^{(1)}\hat{J}_-^{(2)} + \hat{J}_-^{(1)}\hat{J}_+^{(2)}$$

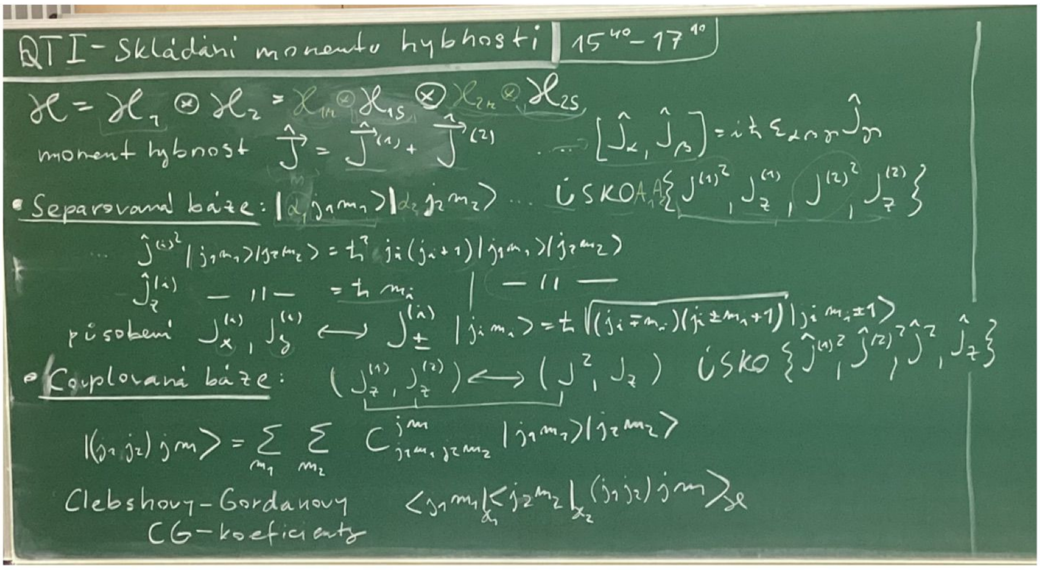
ÚSKO $\{\hat{J}^{(1)2}, \hat{J}^{(2)2}, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ ~ $|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ \text{takové, že} \\ m_1 + m_2 = m}} \underbrace{C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}}_{\text{Clebsch-Gordanovy koeficienty}} |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$

nebo tak něco

volí se tak, aby získané vektory byly vl. vektory $\hat{J}^2$

Přednáška 18

5.12.2024



nulovost Clebsch-Gordanových koeficientů pro $m_1 + m_2 \neq m$:

vím $\hat{J}_z = J_z^{(1)} + J_z^{(2)}$ $\Rightarrow$ $\langle j_1 m_1 | \langle j_2 m_2 | (\hat{J}_z - \hat{J}_z^{(1)} - \hat{J}_z^{(2)}) | j_1 j_2 \, j m \rangle = 0$

$$\Rightarrow \quad 0 = (m - m_1 - m_2) \underbrace{\langle j_1 m_1 | \langle j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle}_{C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}}$$

$\Rightarrow$ buďto $m = m_1 + m_2$
anebo je $C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = 0$

něco jako Δ nerovnost pro kv. čísla j: $\boxed{j_1 - j_2 \leq j \leq j_1 + j_2}$ ... nebudeme zde dokazovat, ale pokud tato nerovnost není splněna, je příslušný Clebsch-Gordanův koeficient taky nula

Konstrukce kaplované báze

skládání momentu hybnosti = konstrukce kaplované báze

$m = m_1 + m_2$ $\Rightarrow$ největší možné m je $m = j_1 + j_2 = j_{max}$ příslušný tomu vl. vektor $|j_{max} j_{max}\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$
(prostě direktní součin)

chtěli bychom teď další vlastní vektory s $j = j_{max}$ a nižšími m
na to máme snižovací operátor $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}$

$J_- |jm\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \, |j(m-1)\rangle$
pro $m = j$
$J_- |jj\rangle = \hbar \underbrace{\sqrt{j(j+1-j+1)}}_{\sqrt{2j}} \, |j(j-1)\rangle$

$$\hat{J}_- |j_{max} j_{max}\rangle = \hbar \sqrt{2 j_{max}} \, |j_{max} (j_{max} - 1)\rangle = (\hat{J}_-^{(1)} + \hat{J}_-^{(2)}) |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle$$

$$= \hbar \left(\sqrt{2j_1} \, |j_1 (j_1 - 1)\rangle |j_2 j_2\rangle + \sqrt{2j_2} \, |j_1 j_1\rangle |j_2 (j_2 - 1)\rangle \right)$$

$$|j_{max} (j_{max} - 1)\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j}} \, |j_1 (j_1 - 1)\rangle |j_2 j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j}} \, |j_1 j_1\rangle |j_2 (j_2 - 1)\rangle$$

$|j_{max} (j_{max} - 2)\rangle$ ... zase působením $\hat{J}_-$
atd.

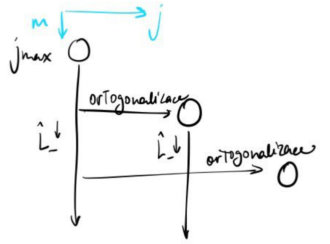
celý prostor má $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ dimenzí ... vl. vektory s $j = j_{max}$ jsme vyčerpali $(2j_{max} + 1)$ dimenzí

chybí nám ještě jeden vektor s $m = j_{max} - 1$; již máme ten s $j = j_{max}$, chybí nám ten s $j = j_{max} - 1$

5.12.2024

víme, že nutně $m = m_1 + m_2$ $\quad j_{max} - 1 = m_1 + m_2 \Rightarrow$ složen z vektorů s $m_1, m_2 = j_{max}, j_{max}-1$ (či opačně)
tento vektor najdeme gram-schmidtovou ortogonalizací, resp. jako kolmý vektor k $|j_{max}, j_{max}-1\rangle$

konstrukce je jednoznačná až na fázovou konvenci – volí se tak, aby separovaný vektor s největším m_1 má kladný koeficient
Condon-Shortleyho konvence



tahle mašinerie se „zastaví" právě včas, aby $j_1 - j_2 \le j$ ... protože máme omezený počet dimenzí!

$$d(\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}) = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

po sloupcích: $\underbrace{(2(j_1+j_2)+1)}_{j=j_{max}} + (2(j_1+j_2)-1) + \dots + (2(j_1-j_2)+1) = \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} 2j+1 = \begin{pmatrix}\text{průměr prvního}\\ \text{a posledního}\\ \text{členu}\end{pmatrix} \cdot (\text{počet členů})$

$$= \frac{1}{2}(2j_1 + \cancel{2j_2} + 1 + 2j_1 - \cancel{2j_2} + 1) \cdot (\cancel{j_1} + j_2 - \cancel{j_1} + j_2 + 1)$$

$$= (2j_1+1)(2j_2+1) \quad \checkmark$$

Př. sčítání momentů hybnosti dvou částic se spinem $\frac{1}{2}$

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \qquad \vec{J}^{(i)} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$

$|+\rangle, |-\rangle$ vl. vektory $\hat{S}_z$, vl. čísla $\pm\frac{\hbar}{2}$

ÚSKO $\{\underbrace{S^{(1)2}, S^{(2)2}}_{\text{nadbytečné}}, S_z^{(1)}, S_z^{(2)}\}$, resp. $\{S_z^{(1)}, S_z^{(2)}\}$

kaplovaná báze ... $\{J^2, J_z\}$ $\qquad \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \le j \le \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \Rightarrow$ 2 možné hodnoty $j = \Big\langle \begin{matrix}0\\1\end{matrix}$

$|j_{max}\, j_{max}\rangle = |11\rangle = |++\rangle$

J_-: $\quad \hbar\sqrt{2}\,|10\rangle = \hbar\left(\sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1\right)}\,|+-\rangle + |-+\rangle\right)$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$$

ortogonalizace $\Rightarrow$ $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$

J_-: $\quad \hbar\underbrace{\sqrt{(1+0)(1-0+1)}}_{\sqrt{2}}\,|1-1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(|--\rangle + |--\rangle)$

$$|1-1\rangle = |--\rangle$$

shrnutí: singlet $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$

triplet $|11\rangle = |++\rangle$
$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$
$|1-1\rangle = |--\rangle$

(PP) částice se spinem v centrálním poli (spinový + orbitální moment hybnosti) 5.12.2024

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2 = \underbrace{\mathcal{H}_r}_{R(r)} \otimes \mathcal{H}_s \otimes \mathbb{C}^2$$

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

separovaná báze $|lm\rangle|s\rangle = \begin{cases} |lm+\rangle \dots Y_{lm}(\theta,\varphi)|+\rangle \\ |lm-\rangle \dots Y_{lm}(\theta,\varphi)|-\rangle \end{cases}$ $\quad |+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\quad |-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\quad |lm+\rangle = \begin{pmatrix}Y_{lm}(\theta,\varphi)\\0\end{pmatrix}$ $\quad |lm-\rangle = \begin{pmatrix}0\\Y_{lm}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\psi_+(\theta,\varphi)\\ \psi_-(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$ spinorbitaly $\qquad \psi_\pm(\theta,\varphi) = \langle r,\theta,\varphi|\langle \pm|\psi\rangle$

kaplovaná báze: snažíme se zkonstruovat bázi společných vl. vektorů operátorů $\{L^2, \underbrace{S^2}_{\text{navíc}}, J^2, J_z\}$, resp $\{L^2, J^2, J_z\}$

značeny $|lJM\rangle$

Jejich příslušná vl. čísla $\quad L^2 \dots l \quad L \dots m \quad J^2 \dots J \quad J_z \dots M$

$S \dots \pm\frac{1}{2} \quad S^2 \dots \frac{1}{2}$

povolená M: $\quad M = m \pm \frac{1}{2}$

povolená J: $\quad l - \frac{1}{2} \le J \le l + \frac{1}{2} \Rightarrow J = l \pm \frac{1}{2}$

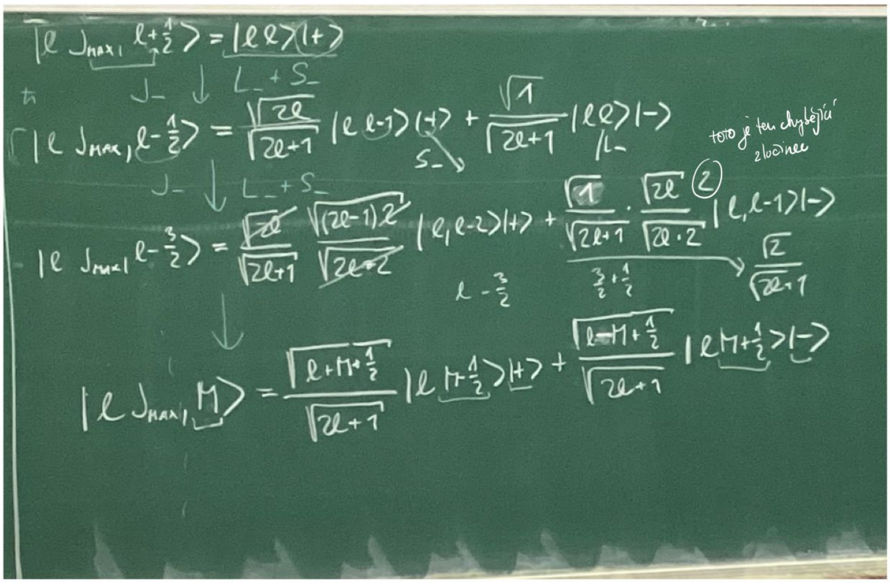
max J $\quad J_{max} = l + \frac{1}{2} \qquad |\underset{l}{l}, \underset{J}{J_{max}}, \underset{M}{l+\tfrac{1}{2}}\rangle = |\underset{l\,m}{ll}\rangle|\underset{s}{+}\rangle$

J_-: $\quad \hbar\sqrt{2l+1}\,|l, J_{max}, l-\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{2l}\,|l(l-1)\rangle|+\rangle + \hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}}\,|ll\rangle|-\rangle$

$$|l, J_{max}, l-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\,|l(l-1)\rangle|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\,|ll\rangle|-\rangle$$

J_-: uhh moc velká mentální gymnastika (zřejmě i na Štěpa, nějak mu to nevycházelo)

mě asi jo



10. 12. 2024

Přednáška 19

Další vlastnosti Clebsch-Gordanových koeficientů

jsou to vlastně prvky matice přechodu mezi bází $|jm\rangle$ a separovanou bází $|m_1 m_2\rangle$

$$C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2} = \langle j_1m_1|\langle j_2m_2|(j_1j_2)jm\rangle = \langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle = \langle j_1j_2jm|j_1j_2m_1m_2\rangle$$

- realnost — protože $C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2} \in \mathbb{R}$ (je zvolena vhodná fázová konvence)

- ortogonalita — matice přechodu mezi dvěma ON bázemi je unitární $UU^+ = U^+U = \mathbb{1}$

  $\Rightarrow$ relace ortogonality

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}\, C^{j'm'}_{j_1m_1j_2m_2} = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{|j_1+j_2|}\sum_{m=-j}^{j} C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}\, C^{jm}_{j_1m_1'j_2m_2'} = \delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}$$

- symetrie — Wignerovy 3j symboly: $(-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{2j+1}\underbrace{\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m\end{pmatrix}}_{3j\text{-symbol}}$

  tvrzení: 3j symbol je invariantní vůči cyklické permutaci sloupců ($j_1 \to j_2 \to j \to j_1$)
  a při liché permutaci přibere znaménko $(-1)^{j_1+j_2+j}$

- **rekurentní relace pro C-G koeficienty**

$$J_\pm = J_\pm^{(1)} + J_\pm^{(2)}$$

$$J_\pm|jm\rangle = \left(J_\pm^{(1)} + J_\pm^{(2)}\right)\underbrace{\underbrace{\left(\sum|j_1m_1'\rangle\langle j_1m_1'|\right)}_{\mathbb{1}}\underbrace{\left(\sum|j_2m_2'\rangle\langle j_2m_2'|\right)}_{\mathbb{1}}|jm\rangle}$$

$$j(j+1)-m(m\pm1) = j^2+j-m^2\mp m$$
$$(j\mp m)(j\pm m+1) = j^2 \cancel{\pm jm} + j \cancel{\mp mj} - m^2 \mp m$$

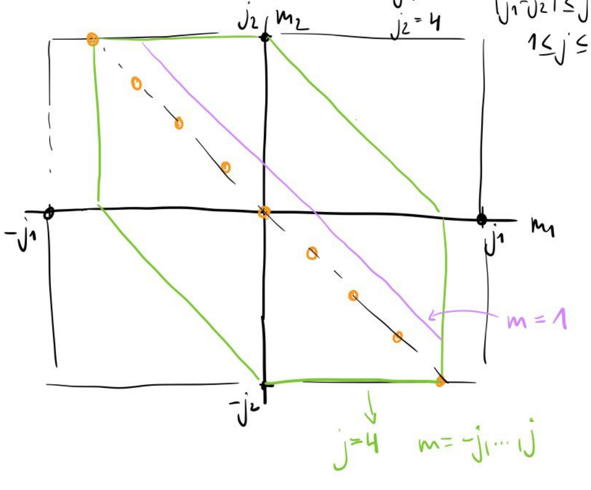
$$\cancel{\hbar}\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j(m\pm1)\rangle = \sum_{m_1'm_2'}\left(J_\pm^{(1)}+J_\pm^{(2)}\right)|j_1m_1'j_2m_2'\rangle\, C^{jm}_{j_1m_1'j_2m_2'}$$

$$= \sum \cancel{\hbar}\left(\sqrt{(j_1\mp m_1')(j_1\pm m_1'+1)}\,|j_1(m_1'\pm1)j_2m_2'\rangle + \sqrt{(j_2\mp m_2')(j_2\pm m_2'+1)}\,|j_1m_1'j_2(m_2'\pm1)\rangle\right)C^{jm}_{j_1m_1'j_2m_2'}$$

obě strany vynásobím $\langle j_1m_1j_2m_2|$

$$\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\;C^{j(m\pm1)}_{j_1m_1j_2m_2} = \sum_{m_1'm_2'}\left(\sqrt{(j_1\mp m_1')(j_1\pm m_1'+1)}\;\delta_{m_1(m_1'\pm1)}\delta_{m_2m_2'} + \sqrt{(j_2\mp m_2')(j_2\pm m_2'+1)}\;\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2(m_2'\pm1)}\right)C^{jm}_{j_1m_1'j_2m_2'}$$

$$\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\;C^{j(m\pm1)}_{j_1m_1j_2m_2} = \sqrt{\underbrace{(j_1\mp(m_1\mp1))}_{(j_1\mp m_1+1)}(j_1\pm m_1)}\;C^{jm}_{j_1(m_1\mp1)j_2m_2} + \sqrt{\underbrace{(j_2\mp(m_2\mp1))}_{(j_2\mp m_2+1)}(j_2\pm m_2)}\;C^{jm}_{j_1m_1j_2(m_2\mp1)}$$



$|j_1-j_2| \le j \le j_1+j_2$

$1 \le j \le 9$

$m = m_1 + m_2 \qquad m_2 = m - m_1$

pro $m=0$ vyhovuje antidiagonála

$|j=4, m=0\rangle$ = lin. kombinace $\{\bullet\}$

ten obrázek se asi dá vidět i z těch relací $|j_1-j_2| \le j \le j_1+j_2$
a $m = m_1+m_2$

Pozn. $\boxed{J^2 = J^{(1)2} + J^{(2)2} + 2\,\vec{J}^{(1)}\cdot\vec{J}^{(2)}}$ 10. 12. 2024

$$\Rightarrow \quad \vec{J}^{(1)}\cdot\vec{J}^{(2)} = \frac{1}{2}\left(J^2 - J^{(1)2} - J^{(2)2}\right)$$

$|jm\rangle$

$$\left(\hat{\vec{J}}^{(1)}\cdot\hat{\vec{J}}^{(2)}\right)|jm\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left(j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)\right)|jm\rangle$$

Sčítání tří a více momentů hybnosti

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)}\otimes\mathcal{H}^{(2)}\otimes\mathcal{H}^{(3)}$$

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)} + \vec{J}^{(3)}$$

chceme přepsat k J^2, J_z

separovaná báze: ÚSKO $\{J^{(1)2}, J_z^{(1)}, J^{(2)2}, J_z^{(2)}, J^{(3)2}, J_z^{(3)}\}$

báze $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle|j_3 m_3\rangle = |m_1 m_2 m_3\rangle$ (j_1, j_2, j_3 fixní)

kaplovaná báze ÚSKO $\{J^{(1)2}, J^{(2)2}, J^{(3)2}, J^2, J_z, \boxed{J^{(1+2)2}}\}$ např.

chyběl nám šestý operátor – kvadrát součtu některých jednotlivých $J^{(i)}$

Komutuje tento operátor s ostatními? $J^{(1)2}, J^{(2)2}$ – ano, skládání 2 momentů hybnosti

$J^{(3)}, J^2, J_z$ – ano, – " – $\vec{J} = \vec{J}^{(1+2)} + \vec{J}^{(3)}$

provádíme jakoby skládání 2 momentů hybnosti dvakrát za sebou

$$J^{(1+2)} = J^{(1)} + J^{(2)}$$

$$J = J^{(1+2)} + J^{(3)}$$

Př. $j_1 = j_2 = j_3 = 1$

složení $J^{(1)} + J^{(2)}$:

j_{12}		
2	$5\times m_{12}$	$m_{12} = -2, \dots, 2$
1	$3\times m_{12}$	$m_{12} = -1, \dots, 1$
0	$1\times m_{12}$	$m_{12} = 0$

složení s $J^{(3)}$:

j		m	dimenze
3	$2+j_3$	$m = -3, \dots, 3$	7
2		$m = -2, \dots, 2$	5
1	$\lvert 2-j_3\rvert$	$m = -1, 0, 1$	3
2		$m = -2, \dots, 2$	5
1		$m = -1, 0, 1$	3
0		$m = 0$	1
$j = 1$		$m = -1, 0, 1$	3

$\parallel$ 27 celkem, což se rovná $3\times3\times3$ = původní dimenze

k domácímu úkolu: 6j symbol souvisí s výměnou $J^{(1+2)}$ za jiný mezistupňový moment hybnosti

Angular Momentum in Quantum Mechanics – monografie

Poznámky na okraj, co se jinam nevešly

Přechod do těžišťového systému

dvě částice $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)}\otimes\mathcal{H}^{(2)}$ $\quad \mathcal{H}^{(i)} = L^2(\mathbb{R}^3)$

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Klasická mechanika: $L(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dot{\vec{r}}_1, \dot{\vec{r}}_2) = \frac{1}{2}m\dot{r}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{r}_2^2 - V(\underbrace{\vec{r}_1 - \vec{r}_2})$

potenciál závisí pouze na relativní poloze těch částic

$\Rightarrow$ translační invariance $\Rightarrow$ těžiště se pohybuje jako volná částice

CMS = centre of mass system $\quad \vec{X} = \dfrac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \quad M = m_1 + m_2$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \qquad \vec{p}_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \qquad P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = p_1 + p_2$$

$\Rightarrow$ přechod k hamiltoniánu $\quad H(X, r, P, p) = \dfrac{P^2}{2M} + \dfrac{p^2}{2\mu} + V(r) \qquad p = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{r}} = \dfrac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{M}$

$H \neq H(X) \Rightarrow P$ je integrál pohybu $\qquad \mu = \dfrac{m_1 m_2}{M}$

QM: stejná transformace v operátoru $\hat{H}$, když si ho člověk napíše jako diferenciální operátor 10. 12. 2024

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\vec{r}_2} + \hat{V}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

$$(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \longrightarrow (\vec{R}, \vec{r})$$

$$(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = -i\hbar\,(\nabla_{r_1}, \nabla_{r_2})$$

(...) hmm, tady toho vlastně není příliš mnoho

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} + \hat{V}(\vec{r})$$

příště: poruchová teorie

Přednáška 20

Stacionární poruchová teorie

- zpravidla diskrétní spektrum

máme problém popsaný hamiltoniánem $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ kde $\hat{H}_1$ je „malé" (těžko říci, co to pro operátor znamená)

resp. zapíšeme to jako $\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ „$\lambda \to 0$"

pak $|\psi_n\rangle = |\psi_n(\lambda)\rangle$, $E_n = E_n(\lambda)$ jsou funkce λ $\qquad \hat{H}_0|\psi_n\rangle = \varepsilon_n|\psi_n\rangle$

chtěli bychom $|\psi_n(\lambda)\rangle \longrightarrow |\psi_n\rangle$ pro $\lambda \to 0$ kde $|\psi_n\rangle$ je vl. vektor $\hat{H}_0$

rozvoj vl. vektorů a energií: $|\psi_n(\lambda)\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_n^{(2)}\rangle + \ldots = |n\rangle + |\Delta\psi\rangle$

Rayleigh-Schrödingerova poruchová teorie

podobně $E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}\lambda + E_n^{(2)}\lambda^2 + \ldots = \varepsilon_n + \Delta E$

pro nedegenerované spektrum $|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1)|\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle$$

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1)\left(|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle\lambda + |\psi_n^{(2)}\rangle\lambda^2 + \ldots\right) = (\underbrace{E_n^{(0)}}_{=\varepsilon_n} + E_n^{(1)}\lambda + E_n^{(2)}\lambda^2 + \ldots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle\lambda + \ldots)$$

porovnáním členů na obou stranách:

$$\lambda^0 \ldots \quad H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = \varepsilon_n|\psi_n^{(0)}\rangle \qquad (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$$

$$\lambda^1 \ldots \quad (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)|\psi_n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}_1)|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\lambda^2 \ldots \quad (\hat{H}_0 - \varepsilon_n)|\psi_n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}_1)|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

... dokud se neřekne jinak, pracuje se s nedegenerovanou hladinou $|\psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle$

$|n\rangle$ je pravděpodobně $|\psi_n\rangle$ ... vlastní vektor $\hat{H}_0$

chybí nám normalizace $\qquad$ normálně bychom chtěli $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ $\quad$ nechceme si zavádět kvadratickou normovací podmínku $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

zde nestandardně $\langle n|\psi_n(\lambda)\rangle = 1 \quad \forall\lambda \implies \langle n|\psi_n^{(0)}\rangle = 1$ & "ostatní" $\langle n|\psi_n^{(i)}\rangle = 0$

(tj. pro další práci s ψ_n je třeba ji na konci přenormovat, normovaná nebude)

výhoda této normalizace: 1) lineární, 2) fixuje i fázi

$$\lambda^s: \quad (H_0 - \varepsilon_n)|\psi_n^{(s)}\rangle = (E_n^{(1)} - H_1)|\psi_n^{(s-1)}\rangle + E_n^{(2)}|\psi_n^{(s-2)}\rangle + \ldots + E_n^{(s)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

vynásobíme tuto rovnici $\langle n|$ zleva

$$(H_0 - \varepsilon_n)\underbrace{\langle n|\psi_n^{(s)}\rangle}_{0} = E_n^{(1)}\underbrace{\langle n|\psi_n^{(s-1)}\rangle}_{0} - \langle n|H_1|\psi_n^{(s-1)}\rangle + E_n^{(2)}\underbrace{\langle n|\psi_n^{(s-2)}\rangle}_{0} + \ldots + E_n^{(s)}\underbrace{\langle n|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1}$$

$$\boxed{\langle n|\hat{H}_1|\psi_n^{(s-1)}\rangle = E_n^{(s)}}$$

$$E_n(\lambda) = \varepsilon_n + \lambda\langle n|\hat{H}_1|n\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

$$s = 1 \qquad \langle n|\hat{H}_1|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}_1|n\rangle$$

korekce energie 1. řádu

korekce $|\psi_n^{(1)}\rangle = \Big(\underbrace{\sum_m |m\rangle\langle m|}_{\mathbb{1}}\Big)|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} |m\rangle\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle$ 12.12.2024

neboť $\langle n|\psi_n^{(1)}\rangle = 0$

rovnice pro λ^1 přenásobená $\langle m|$: $(\varepsilon_m - \varepsilon_n)\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle m|n\rangle}_{=0} - \langle m|\hat{H}_1|n\rangle$

$$\langle m|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{\langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$$

$$\boxed{|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{\varepsilon_n-\varepsilon_m}|m\rangle}$$

korekce vlnové funkce

korekce vyšších řádů jsou důležité, je-li korekce 1. řádu nulová

Korekce 2. řádu energie $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m|\hat{H}_1|n\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \quad \left(+ \int_{\sigma_c} d\varepsilon \frac{|\langle\varepsilon|\hat{H}_1|n\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon}\right)$

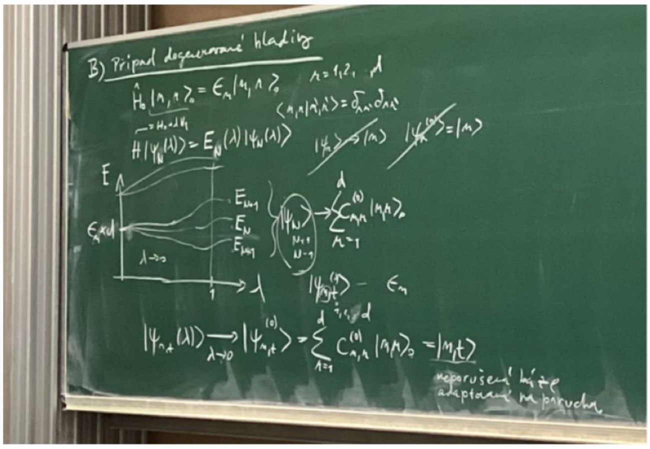
suma může být problematická z hlediska konvergence

má-li operátor H_0 i spojitou část spektra

obecně

$$\langle m|\psi_n^{(s)}\rangle = \frac{\langle m|H_1|\psi_n^{(s-1)}\rangle}{\varepsilon_n-\varepsilon_m} - \sum_{t=0}^{s-1} \frac{E_n^{(s-t)}}{\varepsilon_n-\varepsilon_m}\langle n|\psi_n^{(t)}\rangle$$

problém: když hladina, kterou chceme korigovat, je degenerovaná



r... degenerační index $\quad H_0|n,r\rangle_0 = \varepsilon_n|n,r\rangle_0 \quad r = 1,\dots,d_n$

$|n,r\rangle_0$ ... primární báze $\quad d_n$... stupeň degenerace hladiny ε_n

porušené hladiny $\quad E_{n,t}(\lambda) \xrightarrow[\lambda\to 0]{} \varepsilon_n \quad \exists$ více hladin $E_{n,t}$, co jdou k ε_n, odlišujeme je indexem t, nutně $t = 1,\dots,d_n$

adaptovaná báze $\quad |\psi_{n,t}(\lambda)\rangle \xrightarrow[\lambda\to 0]{} |n,t\rangle = \sum_{r=1}^{d_n} c_{n,r}^{(1)} |n,r\rangle_0$

$|n,t\rangle$ takové vl. stavy H_0

$|n,t\rangle$ jsou ve vlastním podprostoru příslušejícím ε_n, ale ten může být vícedimenzionální ... obecně nějaká lin. komb. $|n,r\rangle_0$

problém: adaptovanou bázi nutně neznám

normalizace $\quad \langle n,t|\psi_{n,t}(\lambda)\rangle = 1 \quad \Rightarrow$ opět $\quad \langle n,t|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle = 1$

$\langle n,t|\psi_{n,t}^{(i)}\rangle = 0 \quad i > 0$

$$|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle = |n,t\rangle$$

λ^1 rovnice násobená $\langle n,r|_0$:

$|n,r\rangle_0$ je neadaptovaná báze, hledáme bázi adaptovanou na poruchu

$$\langle n,r|_0 \underbrace{(\varepsilon_n - \varepsilon_n)}_{=0} |\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = E_{n,t}^{(1)} \langle n,r|_0 \psi_{n,t}^{(0)}\rangle - \langle n,r|_0 \hat{H}_1 |\psi_{n,t}^{(0)}\rangle$$

$$|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle = \sum_{r'} c_{r,r'}^{(0)} |r,r_0\rangle$$

toto je 0 $\Rightarrow$ dostáváme podmínku na vlastní stavy $\hat{H}_1$

vl. čísla jsou $E_{n,t}^{(1)} \quad 0 = \langle n,r|_0 E_{n,t}^{(1)} - \hat{H}_1|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle$

$$\sum_{r'} \langle n,r|_0 \hat{H}_1|n,r'\rangle_0\, c_{r,r'}^{(0)} = E_{n,t}^{(1)} \sum \underbrace{\langle n,r|_0|n,r'\rangle}_{\delta_{rr'}} c_{rr'}^{(0)} = E_{n,t}^{(1)} c_{rr}^{(0)}$$

$$\underbrace{\sum \underbrace{\langle n,r|_0 \hat{H}_1|n,r'\rangle_0}_{d\times d \text{ matice poruchy}} c_{rr'}^{(0)} = E_{n,t}^{(1)} c_{rr}^{(0)}}_{\text{problém hledání vlastních čísel}}$$

... hledání vl. stavů $\hat{H}_1$ v explicitní maticové podobě

Přednáška 21

6. 2. 2025

17. 12. 2024

degenerovaný problém $H_0 |n,r\rangle_0 = \varepsilon_n |n,r\rangle_0$

vl. podprostor $\{|n,r\rangle_0\}$ neperturbovaná báze $\longleftrightarrow$ $\{|n,t\rangle\}$ báze adaptovaná na poruchu

$$|\psi_{n,t}(\lambda)\rangle \xrightarrow[\lambda\to 0]{} |n,t\rangle = \sum_r c_{n,r}^{(t)} |n,r\rangle_0$$

↳ vl. stav konverguje k nějakému $|n,t\rangle$, ale to není přímo $|n,r\rangle_0$, ale jejich lineární kombinace

rovnice pro λ^s, $s=1$

1. korekce vlnové funkce:

$$\langle n',t'| (\hat H_0 - \varepsilon_n) |\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = \langle n',t'| (E_n^{(1)} - \hat H_1) \underbrace{|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle}_{|n,t\rangle}$$

$$(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) \langle n',t'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} \underbrace{\langle n',t'|n,t\rangle}_{\delta_{n'n}} - \langle n',t'|\hat H_1|n,t\rangle$$

pro $n \neq n'$ $$\boxed{\langle n',t'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = \frac{\langle n',t'|\hat H_1|n,t\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}} \quad (*)$$

& pro $n'=n$, $t'=t$ je $\langle n',t'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = 0$

chybí nám $n'=n$ $t'\neq t$ ... dají se zjistit z vyšších λ^s

1. řád: najdeme matici poruchy ve vlastním podprostoru ε_n $\quad {}_0\langle n,r|\hat H_1|n,r'\rangle_0 \Rightarrow$ tuto matici diagonalizujeme,

$\Delta E_{n,t}^{(1)}$ jsou vl. čísla

vlastní vektory jsou $\begin{pmatrix} c_{n,r}^{(t)} \\ \vdots \end{pmatrix}$ $r=1,\dots,d$

korekce 2. řádu

normalizace $\langle n,t|\psi_{n,t}(\lambda)\rangle = 1$

$$\langle n,t'|\psi_{n,t}^{(0)}\rangle = \langle n,t'|n,t\rangle = \delta_{tt'}$$

$$\boxed{E_{n,t}^{2} = \sum_{t'} \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle n,t|H_1|n',t'\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}}$$

$\sum\sum |n't'\rangle\langle n't'|$

$$E_{n,t}^{(2)} = \langle n,t|\hat H_1|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = \sum_{t} \underbrace{\langle n,t|\hat H_1|n,t'\rangle}_{\sim\delta_{tt'}} \underbrace{\langle n,t'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle}_{\langle n,t|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle = 0 \text{ z normalizace}}$$

$$+ \sum_{t'} \sum_{n\neq n'} \langle n,t|\hat H_1|n',t'\rangle \underbrace{\langle n',t'|\psi_{n,t}^{(1)}\rangle}_{\frac{\langle n',t'|H_1|n,t\rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}} \;(*)$$

$$= \sum_{t'} \sum_{n'\neq n} \frac{|\langle n,t|\hat H_1|n',t'\rangle|^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}}$$

└ Rayleigh – Schrödingerova poruchová teorie

jsou z ní explicitní vzorečky pro energie

vs. Brillouin – Wignerova poruchová teorie

- stejné principy
- nevznikají problémy s degenerovanými hladinami
- ale výsledkem implicitní vzorce (korekce energie $E_n^{(s)}$ na obou stranách rovnic)

výhoda: rovnou řeší i degenerované hladiny

máme hamiltonián bez poruchy

bez poruchy: $H_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$

projektor na zbytek $\mathcal{H}$ bez vlastního podprostoru příslušejícímu ε_n

Definujeme projektor $Q_n = \sum_{n'\neq n} |n'\rangle\langle n'| = \mathbb{1} - |n\rangle\langle n|$ $\quad \mathbb{1} = Q_n + |n\rangle\langle n|$

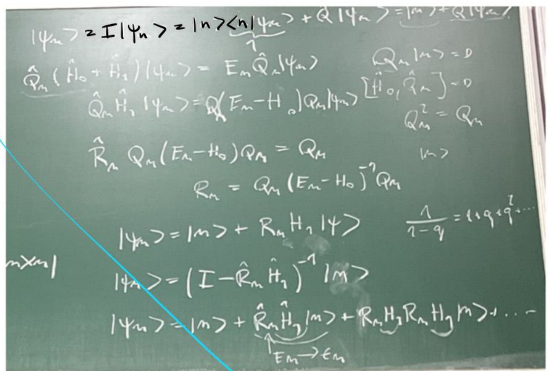
$[Q_n, H_0] = 0$

✻ $H = H_0 + H_1$ (kde $\lambda = 1$) jakoby λ není důležitá

✻ $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ $\quad \langle n|\psi_n\rangle = 1$

rozložíme hledané $|\psi_n\rangle$ na 2 projekce

$$|\psi_n\rangle = \mathbb{1}|\psi_n\rangle = \underbrace{Q_n|\psi_n\rangle}_{\text{zbytek}} + \underbrace{|n\rangle}_{\text{vl. podprostor } H_0}\underbrace{\langle n|\psi_n\rangle}_{1 \text{ ... normalizace}} = |n\rangle + Q_n|\psi_n\rangle$$



$$\hat Q_n (\hat H_0 + \hat H_1)|\psi_n\rangle = E_n \hat Q_n|\psi_n\rangle \qquad \hat Q_n \hat H_1|\psi_n\rangle + \hat H_0 \hat Q_n|\psi_n\rangle = \hat Q_n E_n|\psi_n\rangle$$

$\hat Q_n$ komutuje s $\hat H_0$

$$\hat Q_n \hat H_1 |\psi_n\rangle = Q_n(E_n - H_0) Q_n|\psi_n\rangle$$

jsou tu 2 Q_n, jedno jakoby navíc – ale Q_n je projektor, takže $\hat Q_n^2 = \hat Q_n$

$$\hat R_n Q_n (E_n - H_0) Q_n = Q_n$$

jednotkový operátor v podprostoru $n\neq n'$

$E_n - H_0$ je singulární ve vlastním podprostoru P_n, v doplňkovém podprostoru $P_{n'}$ $n'\neq n$ ale invertovat jde, takže to uděláme

$$\boxed{\hat R_n = \hat Q_n (E_n - \hat H_0)^{-1} \hat Q_n}$$

$\hat R_n$ je inverze $(E_n - H_0)$ v podprostoru $\{|n'\rangle, n'\neq n\}$

$\hat R_n \hat Q_n \hat H_1 = \hat Q_n \quad \hat R_n \hat Q_n = \hat R_n \Rightarrow \hat R_n \hat H_1 = \hat Q_n$

$$\hat R_n \hat H_1 |\psi_n\rangle = \hat Q_n |\psi_n\rangle$$

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |n\rangle \overset{(*)}{+} \underbrace{\hat R_n \hat H_1 |\psi_n\rangle}_{\text{korekce}}}$$

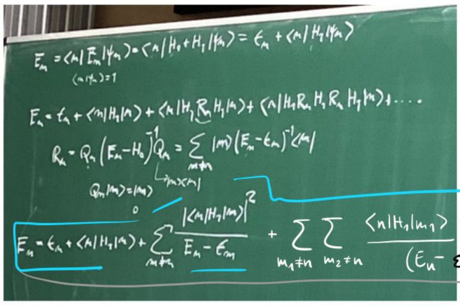
$$(*)\; |\psi_n\rangle = (\mathbb{1} - \hat R_n \hat H_1)^{-1} |n\rangle = \underbrace{|n\rangle + \hat R_n \hat H_1 |n\rangle + R_n H_1 R_n H_1 |n\rangle + \dots}_{\text{řada – jsou vidět různé řády poruchy}}$$

potřebujeme spočítat inverzi nějakého operátoru – těžké $\Rightarrow$ místo toho rozvoj geometrické řady

tohle je hlavní výsledek BW poruchové teorie

$$\frac{1}{1-q} = \sum_{k=0}^{\infty} q^k$$

problém: řada v R_n obsahuje energie E_n, které přesně neznáme



$$\frac{\langle m_1|H_1|m_2\rangle\langle m_2|H_1|n\rangle}{\varepsilon_{m_1})(E_n - \varepsilon_{m_2})}$$

tenhle

"$R_n = R_n(E_n)$"

17.12. 2024

energie: $E_n = E_n \cdot 1 = E_n\langle n|\psi_n\rangle = \langle n|E_n|\psi_n\rangle = \langle n|\hat{H}|\psi_n\rangle$
$= \langle n|\hat{H}_0 + \hat{H}_1|\psi_n\rangle = \varepsilon_n \underbrace{\langle n|\psi_n\rangle}_{1} + \langle n|H_1|\psi_n\rangle$ dosadíme za $|\psi_n\rangle$

$$E_n = \underbrace{\varepsilon_n + \langle n|H_1|n\rangle}_{\text{stejné jako v RS por. teorii}} + \langle n|R_n H_1|n\rangle + \langle n|R_n H_1 R_n H_1|n\rangle + \dots$$

R_n umíme napsat explicitním spektrálním rozkladem

$$R_n = Q_n (E_n - H_0)^{-1} Q_n = \sum_{n'\neq n} \frac{|n'\rangle\langle n'|}{E_n - \varepsilon_{n'}}$$

když se to dosadí dostaneme finální vzorec BW teorie

přechod od BW k SR:
- můžu zkusit E_n z implicitní rovnice skutečně vypočítat (občas to jde)
- rozhodnu se, že chci jít do 2. řádu: (0) ε_n nechám, (i) $\langle n|H_1|n\rangle$ nechám (0. a i. řád nejsou funkce E_n)
  (ii) potřebuju dosadit za E_n... vím ale, že cokoliv O(3. řád) stejně zahodím
  $\Rightarrow$ dosadím do (ii) členu E_n jen do (0.) řádu, tj. ε_n
  $\Rightarrow$ dostávám stejný vzorec jako z SR teorie

chci jít do 3. řádu... podobně: do (ii) dosadím $E_n = \varepsilon_n + \langle n|H_1|n\rangle$
∂ (iii) dosadím $E_n = \varepsilon_n$ (už se liší od SR)

VARIAČNÍ PRINCIPY

pro řešení vlastního problému samosdruženého pozitivně definitního operátoru
zde zpravidla hledání stacionárních stavů – Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$E[|\psi\rangle] = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \qquad \forall|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

→ střední hodnota hamiltoniánu

funkcionál (energie)

Ritzův variační princip v kostce: energie zákl. stavu odpovídá minimu tohoto funkcionálu
resp. stacionární stavy systému s $\hat{H}$ jsou zároveň stacionární stavy tohoto funkcionálu energie, tj. $\delta E = 0$

variace δE $\qquad |\psi\rangle \to |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle \qquad \frac{\|\delta\psi\|}{\|\psi\|} \ll 1$

zanedbáme členy řádu vyššího než prvního

$$\delta E = E[|\psi\rangle + |\delta\psi\rangle] - E[|\psi\rangle] = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{H}|\delta\psi\rangle + \langle\delta\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \cancel{\langle\delta\psi|\hat{H}|\delta\psi\rangle}}{\langle\psi|\psi\rangle + \langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle + \cancel{\langle\delta\psi|\delta\psi\rangle}} - \underbrace{\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}}_{=E} + O(|\delta\psi\rangle^2)$$

$$= \frac{\cancel{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle} - \cancel{E\langle\psi|\psi\rangle} + \langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{H} - E|\delta\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle + \langle\delta\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\delta\psi\rangle} + O(|\delta\psi\rangle^2)$$

$$\delta E = 0 \iff \langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{H} - E|\delta\psi\rangle = 0 \quad \forall|\delta\psi\rangle \quad (**)$$

protože $\forall|\delta\psi\rangle$, implikuje to též

vynásobím i

$0 = -i\langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle + i\langle\psi|H - E|\delta\psi\rangle$

$0 \overset{(*)}{=} \langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle - \langle\psi|H - E|\delta\psi\rangle$

tato ekvivalence není zcela průhledná, avšak je to nějak díky samosdruženosti $\hat{H}$

$\iff (\hat{H} - E)|\psi\rangle = 0 \quad \forall|\delta\psi\rangle \qquad \iff \qquad \langle\psi|(\hat{H} - E) = 0$

dá se ukázat

$(*) + (**) \Rightarrow \langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle = 0 \ \forall|\delta\psi\rangle$
$\Rightarrow (\hat{H} - E)|\psi\rangle = 0$ z toho máme

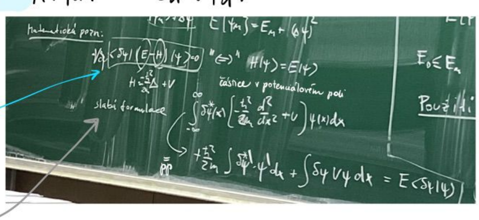
dosazení $|\delta\psi\rangle$ a $i|\delta\psi\rangle$

<u>Tvrzení 1:</u> Funkcionál $E[|\psi\rangle]$ nabývá stacionárních hodnot pro stacionární stavy $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$
a E_n jsou jeho stacionární hodnoty $\quad E[|\psi_n\rangle] = \frac{\langle\psi_n|H|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = E_n$

slovo stacionární – 2 významy
- stacionární body funkcionálu energie
- stacionární stavy v kvantové mechanice – speciální časový vývoj

matematické jemnosti – tzv. „slabá formulace" (spíše na okraj)
problém: $\langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle \ \forall|\delta\psi\rangle$ (P1) a $(\hat{H} - E)|\psi\rangle = 0$ (P2)
nejsou striktně ekvivalentní (P1) může být slabší
záleží na prostorech, z nichž jsou $|\delta\psi\rangle$ a $|\psi\rangle$

⊕ další strana



17.12.2024
6.2.2025

Tvrzení 2: Nechť E_0 je energie základního stavu H. Pak $E_0 \le E[\psi] = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ $\quad\forall\psi\in\mathcal{H}$

Důkaz: $H = \sum E_n |n\rangle\langle n|$
$\mathbb{1} = \sum |n\rangle\langle n|$

$$\frac{\sum_n E_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle}{\sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle} = \frac{\sum E_n |\langle n|\psi\rangle|^2}{\sum |\langle n|\psi\rangle|^2} \ge E_0 \frac{\cancel{\sum |\langle n|\psi\rangle|^2}}{\cancel{\sum |\langle n|\psi\rangle|^2}} = E_0$$

E_0 je nejmenší vlastní hodnota $E_0 \le E_n \ \forall n$

Pro toto tvrzení je stěžejní, že $\hat{H}$ je zdola omezený operátor, tj. $\hat{H} - E_0$ je pozitivně definitní

Použití: $\mathcal{M}$ – množina funkcí $\in \mathcal{H}$
nebo konečně dimenzionální podprostor $\mathcal{V} \in \mathcal{H}$

praktické použití RVP: hledání vl. stavů atomů, molekul, pásová struktura pevných látek

Př. mějme $\mathcal{V}\in\mathcal{H}$ testovací funkce $|\psi\rangle = \alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle + \dots + \alpha_n|\varphi_n\rangle$
$|\delta\psi\rangle = \delta\alpha_1|\varphi_1\rangle + \dots + \delta\alpha_n|\varphi_n\rangle$

(rozvoj do báze $\mathcal{V}$ – $|\varphi_i\rangle$ LNZ)

používáme slabou formulaci tvrzení 1: $\langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle = 0 \ \forall|\delta\psi\rangle$

upravíme a dostaneme rovnici pro koef. α_i: ⊛ $\sum_{ij}\delta\alpha_i^*\langle\varphi_i|H|\varphi_j\rangle\alpha_j - E\sum_{ij}\delta\alpha_i^*\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\alpha_j = 0$

hledejme minimum funkcionálu E na podprostoru $\mathcal{V}$
to bude sice jiné (větší) než minimum na celém $\mathcal{H}$, ale pokud $\mathcal{V}$ zvolíme dobře, může se dobře blížit

$$\sum_i \delta\alpha_i^*\left(\sum_j \langle\varphi_i|H|\varphi_j\rangle - E\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle\right)\alpha_j = 0 \quad \forall\delta\alpha_i$$

$$\iff \sum_j \underbrace{\langle\varphi_i|H|\varphi_j\rangle}_{\substack{\text{matice } H\\ h_{ij}}}\underbrace{\alpha_j}_{\text{vektor}} = \sum_j E\underbrace{\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle}_{S_{ij}}\alpha_j$$

↳ může být δ_{ij}, pokud ON báze

$$\boxed{\sum h_{ij}\alpha_j = \sum E S_{ij}\alpha_j}$$

$\hat{h}\vec{\alpha} = E\hat{S}\vec{\alpha}$ problém na vlastní čísla, resp. zobecněná verze (S_{ij})
používá se např. u molekul

⇒ dostanu odhady vl. energií

hledá se pomocí char. rovnice
$\det(\hat{H} - E\hat{S}) = 0$ ... z toho zobecněná vl. čísla E
pro $\hat{S} = \mathbb{1}$ standardní hledání vl. čísel
(je potřeba ON báze v $\mathcal{V}$)
↳ v praktických případech se tak často nedělá
vždy se dá přejít k ON bázi (ortogonalizovat $\{|\varphi_i\rangle\}$)
– Gram-Schmidtova ortogonalizace – záleží, u kterého vektoru začnu, „nesymetrická"
– symetrická Löwdinova ortogonalizace
nějakým způsobem vytvoří ON bázi, co je co nejpodobnější té původní
$\hat{S} = \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle$ hermitovská a pozitivně definitní
⇒ dá se diagonalizovat, vl. čísla $\mathbb{R}$ a ≥ 0
můžeme napsat spektrální rozklad $S = U^+\Lambda U$
můžeme $\sqrt{S} = U^+\sqrt{\Lambda}\,U$
$\hat{A} = \sqrt{S}^{-1}$ $\quad |\tilde{\varphi}_i\rangle = \sum_j |\varphi_j\rangle A_{ji}$

potom $\langle\tilde{\varphi}_i|\tilde{\varphi}_k\rangle = \sum_j A_{ij}\langle\varphi_j|\sum_l|\varphi_l\rangle A_{lk} = \sum_{jl} S_{jl}\sqrt{S}^{-1}_{ij}\sqrt{S}^{-1}_{lk} = \mathbb{1}$, kde $S_{jl} = \sqrt{S}_{jm}\sqrt{S}_{ml}$

$$\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{S}|\psi\rangle \longrightarrow \underbrace{\frac{1}{\sqrt{S}}\hat{H}\frac{1}{\sqrt{S}}\underbrace{\sqrt{S}|\psi\rangle}_{|\phi\rangle} = E\underbrace{\sqrt{S}|\psi\rangle}_{|\phi\rangle}}_{\text{standardní problém vl. čísel}}$$

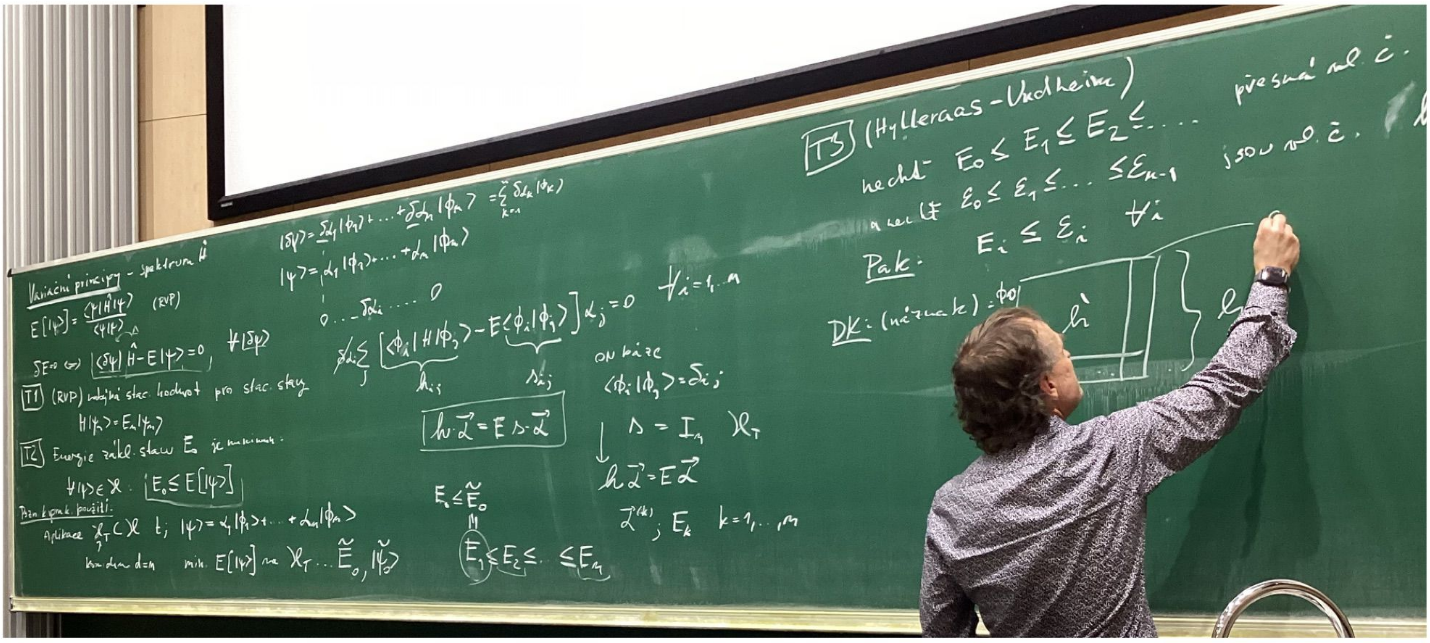
19.12.2024 se psala zápočtová písemka
(místo přednášky 22)

pokud zvolíme místo podprostoru podmnožinu:
to jde ... prostě vln. funkce závisí na nějakých parametrech
např. $\psi(x,\alpha) = e^{-\alpha x^2}$ (je to narozdíl od podprostoru nelineární)
hledáme minimum funkce více proměnných
nulujeme parciální derivace

Přednáška 23

7. 1. 2025

Variační principy – spektrum $\hat{H}$

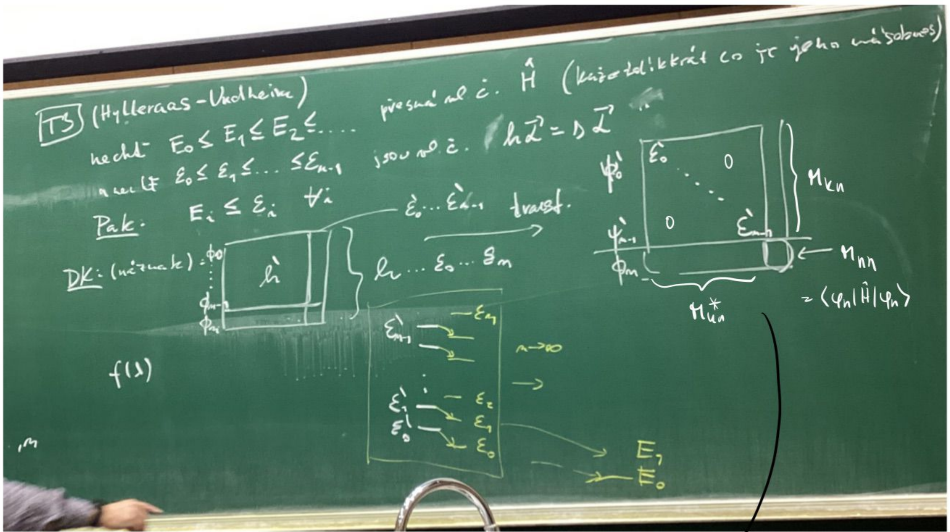


$\boxed{T3}$ **Hylleraas-Undheimův teorém**

nechť $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$ přesná vlastní čísla $\hat{H}$
a nechť $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \dots \leq \varepsilon_{n-1}$ jsou vl. čísla $h\vec{\alpha} = s\vec{\alpha}$

Pak $E_i \leq \varepsilon_i \quad \forall i$

náznak důkazu: indukcí



$f(\lambda) = \det(M - \lambda \mathbb{1})$
char. polynom

$\det(M - \lambda\mathbb{1})$ ... rozvoj podle posledního sloupce/řádku

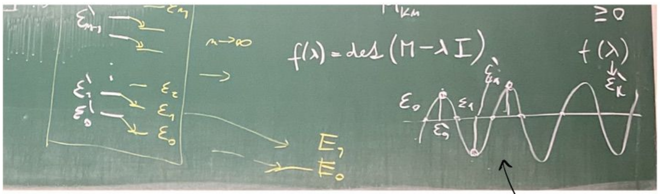
$$f(\lambda) = \det(M - \lambda\mathbb{1}) = \underbrace{(M_{nn} - \lambda)\prod_k(\varepsilon_k' - \lambda)}_{\text{poslední prvek řádku}} - \underbrace{\sum_{k=0}^{n} |M_{kn}|^2 \prod_{l \neq k}(\varepsilon_l' - \lambda)}_{\text{ostatní}}$$

7. 1. 2025

Dosadíme-li $\lambda = \varepsilon_1'$ $\qquad 0 = -|M_{kn}|^2 \prod_{\ell \neq k} (\varepsilon_{\ell}' - \varepsilon_1')$

ééé wtc

point is:



kořeny charpolynomu v ε_i

v ε_i' se ukáže, že charpolynom mění znaménka

⇒ kořeny charpolynomu někde mezi ε_i'

⇒ $\varepsilon_i \le \varepsilon_i'$ $\forall i$

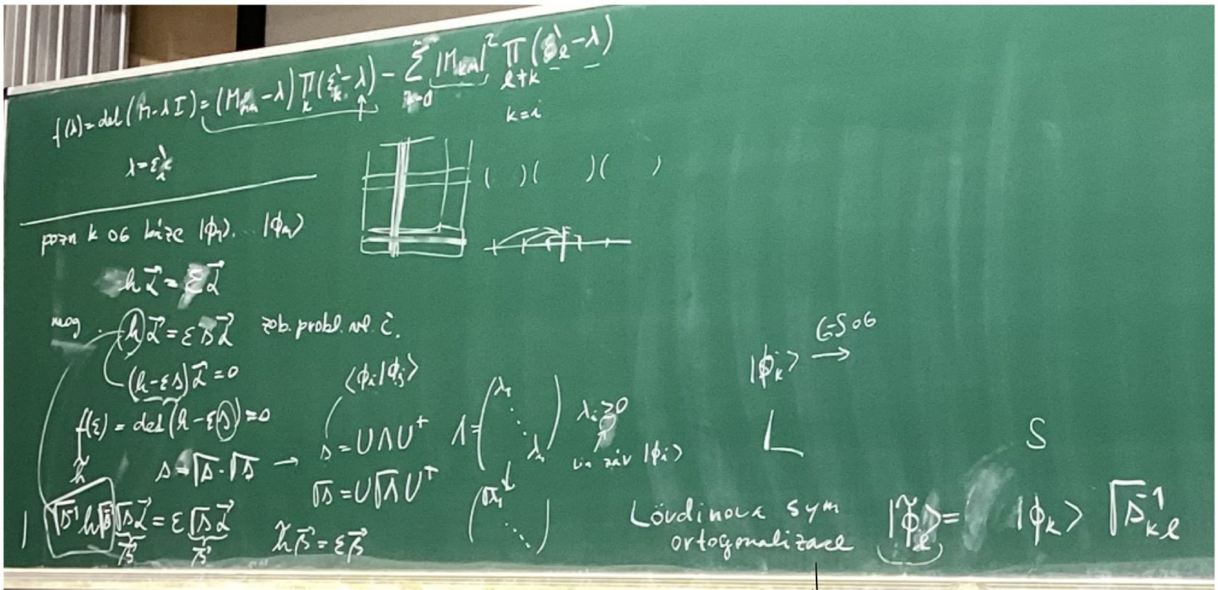
⇒ $E_i \le \varepsilon_i$ $\forall i$

se zvyšováním dimenze podprostoru se zlepšují odhady energie

vždy jsou to ale horní odhady

vl. čísla s čárkou a bez čárky se navzájem oddělují

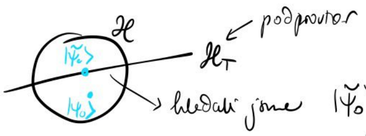
* přišla jsem o 20 minut pozdě a nějak si vůbec nejsem jistá, co se na téhle přednášce děje *



najde OG bázi, která má všechny vektory nějak nejblíž k těm původním neortogonálním

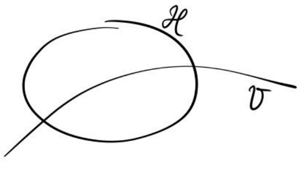
Nelineární množina testovacích funkcí

předtím jsme dělali:



hledali jsme $|\psi_0\rangle \in \mathcal{H}_T$ takové, aby bylo $|\psi_0\rangle$ nejblíž ve smyslu normy $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \|\psi\|_H$

co když místo podprostoru vezmeme nějakou podmínku



7.1.2025

$$\psi_{\vec\alpha}(x,y,z) = e^{-\alpha(x-y)^2} + e^{-\alpha_2(y-z)^2}$$ ... nějaká aproximace vlnové funkce

$$\frac{\langle \psi_{\vec\alpha} | \hat H | \psi_{\vec\alpha} \rangle}{\langle \psi_{\vec\alpha} | \psi_{\vec\alpha} \rangle} = E_{\vec\alpha} \Rightarrow \underbrace{\text{minimum}}_{\vec\alpha_0} \cong E_0$$

$E_{\vec\alpha}$: funkce $\vec\alpha$, ne funkcionál

byla tady poznámka o použití symetrií na variační principy

typicky se variačně hledají zákl. stavy

např. ale částice v sudém potenciálu $\Rightarrow$ lze hledat liché a sudé vlnové funkce zvlášť $\Rightarrow$ můžeme najít nejnižší sudý a nejnižší lichý stav zvlášť (jeden z nich už bude excitovaný)

sféricky sym. potenciál : H má bloky pro různá l

vl. funkce L^2, L_z

Nerozlišitelnost částic, výměnná symetrie

Příklad: Atom helia (2 identické částice ve sférickém poli)

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(\vec r_1) + V(\vec r_2) + V_{int}(|\vec r_1 - \vec r_2|)$$

V_{int} … interakční potenciál, často (ne vždy) závisí na vzdálenosti částic

$$\mathcal{H} = \underbrace{L_2(\mathbb{R}^3)}_{\text{částice 1}} \otimes \underbrace{L_2(\mathbb{R}^3)}_{\text{částice 2}} \qquad \psi(\vec r_1, \vec r_2)$$

$\hat p_1 = -i\hbar\nabla \otimes \mathbb{1}$ atd.

separované stavy $\underbrace{\varphi_\alpha(\vec r_1)\ \varphi_\beta(\vec r_2)}_{\text{zápis v souř. bázi}} = |\alpha\rangle|\beta\rangle$

částice jsou stejné ... při výměně částic by se měly všechny fyzikální veličiny naměřit stejné

permutační operátor: $\hat P|\alpha\rangle|\beta\rangle = |\beta\rangle|\alpha\rangle \quad \forall$ separované stavy
↳ tvoří bázi $\mathcal{H} \Rightarrow$ operátor definovaný $\forall$ stavy $\in \mathcal{H}$

tzn. $\hat P|\vec r_1\rangle|\vec r_2\rangle = |\vec r_2\rangle|\vec r_1\rangle$

pro každou pozorovatelnou: $\langle\psi|\hat A|\psi\rangle = \langle\psi|\hat P\hat A\hat P|\psi\rangle \quad \forall\psi$
$\Rightarrow \hat A$ a $\hat P$ komutují – tak se pozná výměnná symetrie operátoru

$\hat A = \hat P\hat A\hat P$
$\hat P\hat A = \hat P\hat P\hat A\hat P = \mathbb{1}\hat A\hat P = \hat A\hat P$
$[\hat P, \hat A] = 0$

P^+ je samosdružený $P^+ = P \qquad \langle\psi|P|\psi\rangle = \langle\psi|P|\psi\rangle^*$
vlastní čísla $\hat P$ jsou jen $\lambda = \pm 1 \Rightarrow 2$ vlastní podprostory $\quad P_+ \oplus P_- = \mathcal{H}$
$P^2 = \mathbb{1}$

$|\alpha\beta\rangle \in P_+ \Rightarrow P|\alpha\beta\rangle = |\beta\alpha\rangle = |\alpha\beta\rangle$

$|\alpha\beta\rangle \in P_- \Rightarrow P|\alpha\beta\rangle = |\beta\alpha\rangle = -|\alpha\beta\rangle$

$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad |\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle$
symetrická a antisymetrická část

$$|\psi\rangle = \underbrace{\tfrac12(|\psi\rangle + \hat P|\psi\rangle)}_{|\psi_+\rangle} + \underbrace{\tfrac12(|\psi\rangle - \hat P|\psi\rangle)}_{|\psi_-\rangle}$$

Dva typy částic: fermiony, bosony > jejich stavový prostor je (máme-li dvě) $\mathcal{H}_1 \otimes P_-$, $\mathcal{H}_1 \otimes P_+$

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \qquad |\alpha\beta\rangle, |\beta\alpha\rangle$

$$\tfrac12(|\alpha\rangle|\beta\rangle + |\beta\rangle|\alpha\rangle) = \tfrac12(\mathbb{1} + P)\,|\alpha\rangle|\beta\rangle = \psi^{(S)}_{\alpha\beta}$$

$$\tfrac12(|\alpha\rangle|\beta\rangle - |\beta\rangle|\alpha\rangle) = \tfrac12(\mathbb{1} - P)\,|\alpha\rangle|\beta\rangle = \psi^{(A)}_{\alpha\beta}$$

pokud definuju $\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\hat{P}) = \hat{P}_+ = \hat{P}_+^2$ projektory na příslušné podprostory
$\frac{1}{2}(\mathbb{1}-\hat{P}) = \hat{P}_- = \hat{P}_-^2$

Symetrizační postulát – v přírodě nastává jeden z těchto případů

(a) částice má celočíselný spin a její mnohočásticové stavy jsou totálně symetrické
= BOSONY

(b) částice má poločíselný spin a její mnohočásticové stavy jsou totálně antisymetrické
= FERMIONY

Na úrovni kv. mechaniky tohle musí být postulát
něco něco souvislost mezi spinem a statistikou... kvantová teorie pole

jak poznat fermion od bosonu : $P\,\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1) = \psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ bosony
$= -\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ fermiony

v případě více částic než jsou 2: složitější, nejde rozsekat $\mathcal{H}$ jen na totálně symetrickou a antisymetrickou část
?? něco něco druhé kvantování příští semestr

poslední přednášku : atom helia
možná částice v mag poli

Přednáška 24

9.1.2025

Nerozlišitelné částice se spinem

mějme částici se spinem 1/2
$\mathcal{H}^{(1)} = \mathbb{C} = \mathcal{H}^{(2)}$ $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$

stavy v $\mathcal{H}$... báze $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$, $|--\rangle$

chtěli bychom: $\mathcal{H} = \mathcal{H}^S \oplus \mathcal{H}^A$

$\mathcal{H}^S$ ... aplikujme $\hat{P}_S = \frac{1}{2}(\mathbb{1}+\hat{P})$

$$\left.\begin{array}{l} |++\rangle \longrightarrow |++\rangle \\ \left.\begin{array}{l} |+-\rangle \longrightarrow \frac{1}{2}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) \\ |-+\rangle \longrightarrow \frac{1}{2}\left(|-+\rangle + |+-\rangle\right) \end{array}\right\}\text{stejné} \\ |--\rangle \longrightarrow |--\rangle \end{array}\right\} 3D$$

spinový triplet
$J = 1$ $M = -1, 0, 1$

$\mathcal{H}^A$ ... aplikujeme $\hat{P}_A = \frac{1}{2}(\mathbb{1}-\hat{P})$

$$\left.\begin{array}{l} |++\rangle \longrightarrow 0 \\ \left.\begin{array}{l} |+-\rangle \longrightarrow \frac{1}{2}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right) \\ |-+\rangle \longrightarrow \frac{1}{2}\left(|-+\rangle - |+-\rangle\right) \end{array}\right\}\text{lineárně závislé} \\ |--\rangle \longrightarrow 0 \end{array}\right\} 1D$$

spinový singlet
$J = 0 = M$

Prostorové stupně volnosti $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ $\mathcal{H}^{(i)} = L^2(\mathbb{R}^3)$
$\hookrightarrow \psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ ... báze: $\varphi_\alpha(\vec{r}_1)\,\varphi_\beta(\vec{r}_2)$ $\longrightarrow$ stavy $\alpha = \beta$ jsou v $\mathcal{H}^{(S)}$
a v $\mathcal{H}^{(A)}$ zcela chybí
= Pauliho vylučovací princip

$$\psi_{S/A} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_\alpha(\vec{r}_1)\,\varphi_\beta(\vec{r}_2) \pm \varphi_\alpha(\vec{r}_2)\,\varphi_\beta(\vec{r}_1)\right)$$

Atom helia

9.1.2025

2 elektrony v Coulombickém potenciálu

$\mathcal{H}^{(i)} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ $\qquad \mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$

$Z = 2$ protonové číslo

$$\hat{H} = \underbrace{\underbrace{\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1}}_{H_1} + \underbrace{\frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2}}_{H_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{r_{12}}}_{\substack{V \\ \text{porucha}}}$$

$$e^2 = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

elektrony jsou fermiony ... antisymetrická část $\mathcal{H}$

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{nlm}(\vec{r}_1)\, \psi_{n'l'm'}(\vec{r}_2) \pm \psi_{n'l'm'}(\vec{r}_1)\, \psi_{nlm}(\vec{r}_2) \right) \cdot \chi_{spin}$$

přičemž $\psi_{nlm}(\vec{r})$ jsou vlastní funkce $\hat{H}$ částice v coulombickém poli

χ_{spin} ... buď to: triplet $|1M\rangle$, singlet $|00\rangle$

vlnová funkce musí být antisymetrická: pro $\chi_{spin} =$ $|00\rangle$ je v závorce $+$; $|1M\rangle$ je v závorce $-$

$$\boxed{\hat{H}_0 |\varphi\rangle = (E_n + E_{n'}) |\varphi\rangle}$$

speciálně základní stav ... co nejnižší energie

pro energetické hladiny v atomu helia platí $\qquad E_n = -\frac{4\,Ry}{n^2}$

pro atom vodíku je $E_n = -\frac{1Ry}{n^2}$ kde $1\,Ry = \frac{e^2}{a_0} = \frac{me^4}{\hbar^2}$ $\qquad$ tzn. $E_n^{(H)} = -\frac{me^4}{\hbar^2 n^2}$

v atomu helia je ale náboj $2\times$ větší $\Rightarrow$ záměna $e^2 \to 2e^2$

$$E_n^{(He)} = -\frac{4me^4}{\hbar^2 n^2}$$

energie základního stavu: $n = 1$ pro oba elektrony

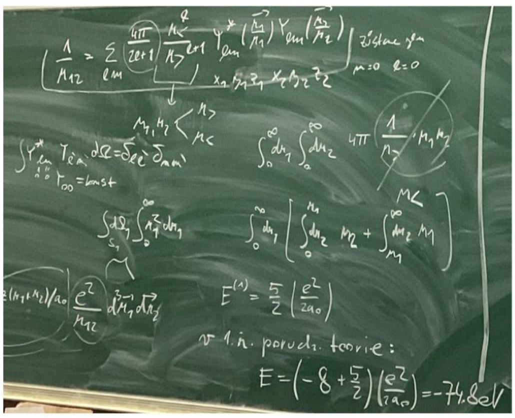
$$\boxed{E_1 + E_1 = -8\,Ry}$$

$$\varphi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3}\, e^{-Z(r_1 + r_2)\frac{1}{a_0}} \quad \chi_{00}$$

vzájemná repulze elektronů: v hrubém přiblížení lze započítat jako poruchu v poruchové teorii

oprava 1. řádu: $\quad E^{(1)} = \langle \varphi_0 | V | \varphi_0 \rangle = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle_{\varphi_0} = \iint \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6}\, e^{-2Z(r_1+r_2)\frac{1}{a_0}}\, \frac{e^2}{r_{12}}\, d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2$

provede se multipólový rozvoj

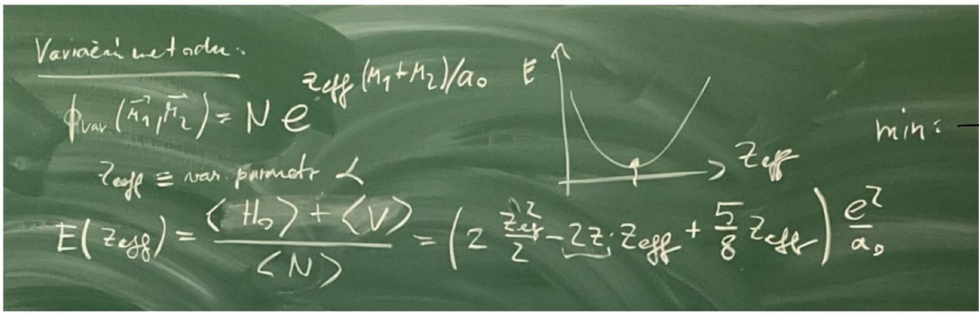


$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{lm} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}\, Y^*_{lm}\!\left(\frac{\vec{r}_1}{r_1}\right) Y_{lm}\!\left(\frac{\vec{r}_2}{r_2}\right)$$

kde $r_<$ je menší z čísel r_1, r_2; $r_>$ je větší z čísel r_1, r_2

pak se z rozvoje úhlovou integrací sférických harmonik většina členů integruje na nulu $\Rightarrow$ zbyde jen 1

9.1.2025



min: $\longrightarrow$ vyjde v $Z_{eff} = Z - \frac{5}{16}$

$\Downarrow$

$E_{var} = -77{,}5$ eV

Hylleraas 1929–30 vzal $\psi = \sum_{k,l,m} C_{klm} s^k t^l u^r e^{-s/2}$

$s = r_1 + r_2$

$t = r_1 - r_2$

$u = r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

$\Downarrow$

variační principy

$\Downarrow$

můžě spočetl energie atomu helia s dost dobrou přesností

Částice v magnetickém poli

hamiltonián: $\frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m}$ $\qquad \vec{A}(\vec{x})$

v kv. mechanice prostě jen operátory

z $(\vec{p} - q\vec{A})^2$ se dá vzít jen lineární člen a započítat poruchovou teorií $\Rightarrow$ lineární Zeemanův jev

co se nestihlo: matice hustoty – bude v QT II